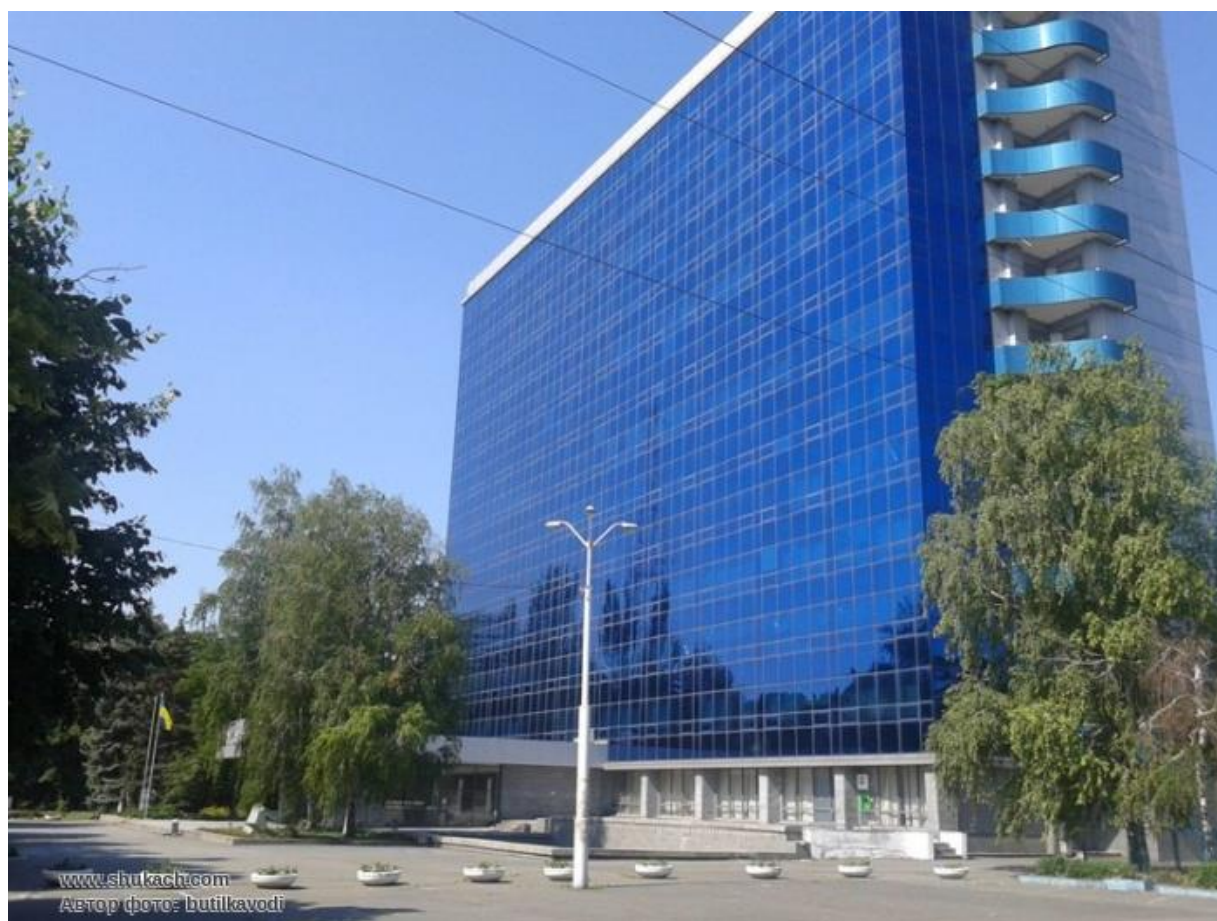


**МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ДНІПРОВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ОЛЕСЯ ГОНЧАРА**

**Інститут органічної хімії
НАН України**

XXI ВСЕУКРАЇНСЬКА КОНФЕРЕНЦІЯ
молодих вчених та студентів
з актуальних питань сучасної хімії



МАТЕРІАЛИ КОНФЕРЕНЦІЇ

Дніпро
22-25 травня 2023 р.

XXI Всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань сучасної хімії, Дніпро, 22-25 травня 2023 р.

**МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ДНІПРОВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ОЛЕСЯ ГОНЧАРА**

**Інститут органічної хімії
НАН України**

XXI ВСЕУКРАЇНСЬКА КОНФЕРЕНЦІЯ
МОЛОДИХ ВЧЕНИХ ТА СТУДЕНТІВ
з актуальних питань сучасної хімії



Дніпро
22-25 травня 2023 р.

XXI Всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань сучасної хімії, Дніпро, 22-25 травня 2023 р.

ПРОГРАМНИЙ ОРГАНІЗАЦІЙНИЙ КОМІТЕТ

Голова - *Варгалюк Віктор Федорович*, декан хімічного факультету ДНУ, д-р хім. наук, професор, заслужений діяч науки і техніки України

Відповідальний секретар – *Маторіна Катерина Вячеславівна*, доцент кафедри аналітичної хімії та хімічної технології, канд. хім. наук, доцент

Шермолович Юрій Григорович, заступник директора ІОХ НАН України, д-р хім. наук, професор

Оковитий Сергій Іванович, ректор ДНУ, д-р хім. наук, професор

Вишнікін Андрій Борисович, д-р хім. наук, професор

Стець Надія Вікторівна, зав. каф. фізичної, органічної та неорганічної хімії ДНУ, канд. хім. наук, доцент

Варлан Костянтин Єлисейович, зав. каф. аналітичної хімії та хімічної технології ДНУ, канд. хім. наук, доцент

Кондратюк Наталія Вячеславівна, заступник декана з наукової роботи, зав. каф. харчових технологій ДНУ, канд. тех. наук, доцент

Петко Кирило Ігорович, с.н.с. ІОХ НАН України, канд. хім. наук

Матюшок Віктор Іванович, директор Науково-сервісної фірми «ОТАВА» (м. Київ)

Аніщенко Андрій Олександрович, доцент каф. фізичної, органічної та неорганічної хімії ДНУ, канд. хім. наук, доцент

Пальчиков Віталій Олександрович, зав. НДЛ каф. фізичної, органічної та неорганічної хімії ДНУ, ст. наук. співр.

Борщевич Лариса Вікторівна, доцент каф. фізичної, органічної та неорганічної хімії ДНУ, канд. хім. наук, доцент

АДРЕСА ОРГКОМІТЕТУ:

Хімічний факультет (16 корпус),

Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара

вул. Козакова, 22

Дніпро, 49010, Україна

XXI Всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань сучасної хімії, Дніпро, 22-25 травня 2023 р.

УДК 54(063)

ББК 24я431

Т 67

ISBN

Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара
Інститут органічної хімії НАН України

Голова оргкомітету

Варгалюк Віктор Федорович, декан хімічного факультету ДНУ, д-р хім. наук, професор, заслужений діяч науки і техніки України

Т67 «XXI Всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань сучасної хімії» Дніпро, 2023. - 97 с.

ISBN

УДК 54(063)

ББК 24я431

Т 67

Секція
АНАЛІТИЧНА ХІМІЯ

**Керівник: проф., д-р хім. наук Вишнікін Андрій
Борисович**

**Секретар: доц., канд. хім. наук Сидорова Лариса
Петрівна**

**ЕЛЕКТРО-АНАЛІТИЧНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ
ПОТЕНЦІОМЕТРИЧНОГО СЕНСОРУ, СЕЛЕКТИВНОГО ДО
ВІТАМІНУ D₃**

Маторіна К.В., Савчук Н. С.

Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара

49010, м. Дніпро, просп. Гагаріна, 72

Аналіз лікарських препаратів завжди є актуальним питанням аналітичної практики, зараз це питання загострилося через велику кількість фальсифікованої продукції. Виникла потреба в експресному контролі лікарських препаратів, який буде давати надійні результати.

Вирішенням цього завдання є розробка експресних, простих у виконанні, високочутливих методик аналізу. Цим критеріям задовольняють потенціометричні сенсори. Не дивлячись на широкий асортимент відомих методик визначення вітамінів, зокрема вітаміну D₃, методики у більшості потребують високовартісного обладнання, специфічних реагентів та не завжди є достатньо експресними.

Гарне функціонування нашої опорно-рухливої системи напряму пов'язано з вмістом холекальциферолу (ХК), також він став незамінним супутником при комплексному лікуванні коронавірусу разом з вітаміном С та кверцитином. Широким попитом серед населення користується продукція спеціального призначення, яка збагачена певними вітамінами, до яких також відноситься й вітамін D₃. Цю продукцію рекомендується вживати людям з певними захворюваннями, а також тим особам, хто працює та проживає в екстремальних умовах, має високі фізичні або розумові навантаження. При підтримці достатнього рівня холекальциферолу у крові людини, який відповідає нормованим значенням, він запобігає поширенню більшості аутоімунних захворювань.

Перспективним та недорогим є метод прямої потенціометрії з використанням потенціометричних сенсорів, на основі малорозчинних асоціатів гетерополіаніонів. Вітаміни мають високу біологічну активність, що зумовлює необхідність розробки мікроелектродів, наприклад, твердотільних сенсорів, які дають змогу проводити моніторинг їхнього вмісту у харчових продуктах, фармацевтичних препаратах та біорідинах та не вимагають допоміжного використання внутрішнього розчину, як у випадку мембранних електродів.

Метою данної роботи було конструювання потенціометричних сенсорів, чутливих до вітаміну D₃ мембранного та твердо контактного типу, встановлення їх електродно-активних та експлуатаційних характеристик.

Об'єктом дослідження є малорозчинний комплекс, утворений в результаті взаємодії вітаміну D₃ та молібдофосфорної кислоти (МФК). Отриману малорозчинну сполуку використали у якості електродно-активної речовини потенціометричного сенсору. Сконструйовано 2 типи сенсорів: мембранний та твердоконтактний. Для синтезу твердотільного сенсору використовували в якості основи сталеву медичну голку, кінець якої було занурено 5 разів у свіжевиготовлену полімерну мембрану з утворення кульки діаметром 10 мм.

Для порівняння електродно-аналітичних характеристик сконструйованих сенсорів отримали їх електродні функції у водних розчинах вітаміну D₃ (рис.1 а, б). У якості ЕАР використовували: МФК – ХК. У якості внутрішнього розчину для мембранного потенціометричного сенсору використовували спиртовий розчин вітаміну D₃ з концентрацією $C=1 \cdot 10^{-4}$ М. Вимірювання потенціалу повторювали 3 рази. Отримані дані наведені на рис. 1.

Узагальнені результати потенціометричних вимірювань наведені у таблиці 1.

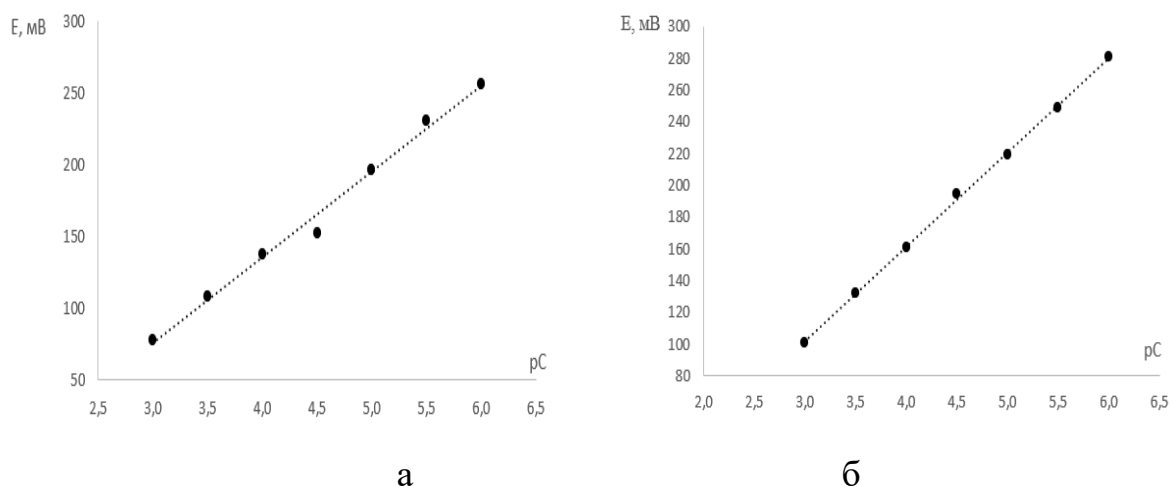


Рис.1. Електродні функції потенціометричні сенсорів на основі МФК – D₃: а - мембранний сенсор; б – твердоконтактний сенсор.

Встановлено, що кондиціонування сконструйованих потенціометричних сенсорів, чутливих до вітаміну холекальциферолу, протягом 1,2 та 3 діб не є доцільним як для твердоконтактного, так й мембранного сенсорів.

Таблиця 1 Електродно-аналітичні характеристики, сконструйованих сенсорів, селективних до вітаміну D₃

Тип електроду	ЕАР	pC	S , мВ/ pC	Час відгуку, хв	Час життя мембрани, міс.
Мембранний	МФК -ХК	3,0-6,0	59,0	3	10
Твердотільний	МФК –ХК	3,0-6,0	60,0	2	12

З таблиці 1 видно, що для всіх запропонованих потенціометричних сенсорів не залежно від типу конструкції спостерігається достатньо широкий інтервал лінійності (3 одиниці pC) та крутизна електродної

функції відповідає теоретичному значенню нахилу нернстівської функції для однозарядних йонів ($S=59-60$ мВ/рС). Час відгуку не перевищує 2 хвилин, тобто відповідає умовам експресного аналізу.

Запропоновані мембранні та твердоконтактні сенсори, селективні до вітаміну Д₃, можна використовувати в аналізі фармацевтичних препаратів, у тому числі у вхідному аптечному контролі, а також в клінічній діагностиці біологічних рідин.

ПЕРЕЛІК ПОСИЛАНЬ

1. Евлаш, В.В. Химия витаминов: учебное пособие / В.В. Евлаш, Н.А. Отрошко, Т.О. Кузнецова; Харьк. гос. ун-т питания и торговли. – Харьков: ХГУПТ, 2014. – 155 с.
2. Kia, Solmaz; Bahar, Shahriyar; Bohlooli, Shahab. A novel electrochemical sensor based on plastic antibodies for vitamin D₃ detection in real samples. IEEE Sensors Journal, 2019, 19.13: 4752-4757.
3. И. Мантров, М. А. Феофанова, С.С Рясенский Тверской государственный университет Ионоселективный электрод для определения никотиновой кислоты в фармацевтических препаратах // Вестник ТвГУ. Серия "Химия". - 2019. - № 2(36). - С. 113 – 118.
4. Камман К. Работа с ионоселективными электродами / К. Камман. – М. : Мир, 1980. – 283 с.
5. Ткач В. І. Гетерополіаніони структури Кегіна як аналітичні реагенти на азотвміщуючі органічні речовини : автореф. ... дис. д-ра хім. наук : 02.00.02 / В. І. Ткач ; Укр. держ. хім.-технол. ун-т. – Дніпропетровськ, 1999. – 35 с.
6. Huang, Lei, et al. Electrochemical vitamin sensors: A critical review. Talanta, 2021, 222: 121645.

ПОТЕНЦІОМЕТРИЧНИЙ СЕНСОР ДЛЯ ВИЗНАЧЕННЯ ВІТАМІНУ В₆

Кондратенко Л.С., Маторіна К.В.

Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара

49010, м. Дніпро, просп. Гагаріна, 72

Вітамін В₆ (піридоксин) є одним з найважливіших вітамінів групи В. Він запускає перебіг більше 150 біохімічних реакцій в нашому організмі. Перетворення їжі, що ми споживаємо, на енергію відбувається саме за його участю, він допомагає ферментам розщепити складні речовини на прості. Піридоксин сприяє розщепленню зайвого жиру у печинці та регулює рівень холестерину. У невеликих кількостях він виробляється флорою нашого кішківника, але найсуттєвішим джерелом його потрапляння є їжа. У м'язових клітинах існує депонований вітамін В₆, це запас, який екстрено використовується у випадку, коли швидко треба забезпечити клітини глюкозою, для метаболізму якої необхідний цей вітамін.

Піридоксин входить до комплексної терапії при лікуванні різних патологій шкіри, впливає на діяльність нашого мозку (настрій, зміну циклів сну та активності, процесів збудження та заторможення та ін.). Найвагоміший внесок вітаміну В₆ відмічено у профілактиці онкологічних захворювань та сприянні репродуктивному здоров'ю.

Актуальним є питання контролю піридоксину в продуктах харчування, визначення його вмісту у лікарських препаратах та у клінічній діагностиці біоридин для встановлення причин тих чи інших захворювань, які часто пов'язані саме з нестаточою, а рідше надлишком вітамінів певного виду.

Піридоксин міститься у різних рослинах та органах тварин. Особливо багато його в зернових паростках, у волоських горіхах і ліщині, дріжджах,

шпинаті, картоплі, моркві, цвітній і білокачанній капусті, помідорах, полуниці, черешні, апельсинах і лимонах, молоці, рибі, м'ясі, печинці трески та великої рогатої худоби, яєчному жовтку.

Серед електрохімічних методів визначення вітаміну В₆ є потенціометричний метод, метод капілярного електрофорезу та вольтамперометричний метод. При розробці методик аналізу треба враховувати той факт, що частіше всього цей вітамін треба визначати у сіміші з іншими вітамінами.

Мета роботи: сконструювати потенціометричний сенсор, селективний до вітаміну В₆, та встановити його електродно-аналітичні характеристики. За електродно-активну речовину (ЕАР) у мембранному сенсорі використали йонний асоціат алізаринового червоного (АЧ) з піридоксин гідрохлоридом (ПГ) попередньо синтезованого з водних розчинів реагентів. ЕАР речовина рівномірно розподілилася у полівінілхлоридній матриці під час синтезу полімерної мембрани потенціометричного сенсору.

Сконструйований мембранний електрод з ЕАР на основі асоціату АЧ-ПГ випробували у водних розчинах вітаміну В₆ для отримання електродної функції. У якості внутрішнього розчину використали розчин ПГ з концентрацією $1 \cdot 10^4$ моль/л. Дінамічний діапазон знаходиться в інтервалі 2,0-4,5 рС, при цьому крутизна електродної функції $S=32$ мВ/рС, що відповідає теоретичному нернстівському нахилу для двохзарядного йону. Дрейф потенціалу не перевищує 2 мВ/добу. Час відгуку електроду складає 60 сек, що повністю задовільняє вимогу експресності визначення.

Встановлено, що проводити кондиціонування запропанованого потенціометричного сенсору, селективного до вітаміну В₆ не є доцільним. Сконструйований сенсор можна використовувати для кількісного визначення ПГ у водних розчинах.

**ЗМІНИ ХІМІЧНОГО СКЛАДУ КІСТОК СКЕЛЕТУ ТВАРИН
АДАПТОВАНИХ ДО ЗАГАЛЬНОГО ЗНЕВОДНЕННЯ, ТА У
ПЕРІОД РЕАДАПТАЦІЇ**

Гайда А., Пелих С., Киричок О., Бурячишен Н., Вітрук Я., Балич І.

ДВНЗ «Тернопільський національний медичний університет

імені І.Я. Горбачевського МОЗ України»

м. Тернопіль, Україна

Експеримент було проведено на 60 білих статевонезрілих щурах-самцях, віком 1,5 місяці. Тварин розділяли на три підгрупи: перша дослідна група - адаптовані до зневоднення щурі (Д1); друга – неадаптовані щурі (Д2); третя - контрольні щурі (К). Експеримент складався з наступних етапів: I – адаптація до загального зневоднення; II – загальне зневоднення; III - реадаптація.

Мета дослідження. Виявити закономірності адаптивних перетворень довгих трубчастих кісток скелета молодих тварин в умовах реадаптації після настання загальної дегідратації важкого ступеня.

На атомному абсорбційному спектрофотометрі С-115 визначали масову частку макроелементів (кальцію, калію, натрію, магнію) та мікроелементів (свинцю, марганцю, міді, цинку, заліза).

При порівнянні масової частки мікроелементів у плечових кістках адаптованих і контрольних статевонезрілих тварин через 6 тижнів відновного періоду було виявлено, що масова частка марганцю у тварин групи Д1 в плечових кістках становила $(9,33 \pm 0,34)$ %, а у контрольної - $(8,89 \pm 0,17)$ %. Різниця – 4,95 % ($p < 0,05$). Масова частка свинцю у тварин групи Д1 в плечових кістках становила $(4,29 \pm 0,04)$ мг %, а в контрольної групи - $(4,67 \pm 0,09)$ мг %. Різниця – 8,14 % ($p < 0,05$).

Масова частка міді у тварин групи Д1 в плечових кістках становила

(28,61±0,63) мг %, а в контрольній групі - (27,04±0,68) мг %. Різниця – 5,81 % ($p < 0,05$). Масова частка цинку у тварин групи Д1 в плечових кістках становила (448,53±4,95) мг %, а у контрольній - (439,74±2,29) мг %. Різниця – 2,00 % ($p < 0,05$). Масова частка заліза у тварин групи Д1 в плечових кістках становила (0,89±0,03) мг %, а у контрольній - (0,90±0,02) мг %. Різниця – 1,11 % ($p < 0,05$).

Співставлення масових часток остеотропних мікроелементів у молодих тварин груп Д1 і К через 6 тижнів відновного періоду дозволили нам ствердити, що в групі Д1 початок активних відновних процесів проявляється зростанням масової частки остеотропних мікроелементів вперше після інерційного порушення, викликаного важким ступенем загального зневоднення. За однакових умов утримання експериментальних тварин груп Д1 і Д2 втрата мінерального компоненту кістками у групах неадаптованих статевонезрілих тварин переважає аналогічні показники групи Д1.

Висновки. 1. В адаптованих до дегідратації статевонезрілих тварин розвиваються компенсаторно-приспосувальні процеси, які спрямовані на забезпечення функцій довгих трубчастих кісток скелета в екстремальних умовах загального зневоднення та в період реадаптації.

2. Зміни у мінеральному складі довгих трубчастих кісток в статевонезрілих тварин в умовах загального зневоднення важкого ступеня та у відновний період наявні в тварин груп Д1 і Д2, проте режим адаптації істотно сповільнює втрату хімічного складу кісток в адаптованих тварин, порівняно з неадаптованими їх ровесниками.

**ВІДНОВНІ ЗМІНИ ОРГАНІЗМУ
ПРИ ПОРУШЕННІ ВОДНО-СОЛЬОВОГО ОБМІНУ В УМОВАХ
ЗАГАЛЬНОЇ ДЕГІДРАТАЦІЇ**

Киричок О., Бурячишен Н., Присяжна О., Пелих С.,
Балич І., Гайда А., Клімова О.

ДВНЗ «Тернопільський національний медичний університет

імені І.Я. Горбачевського МОЗ України»

м. Тернопіль, Україна

Дослідили особливості росту довгих кісток скелета при адаптації організму до загальної дегідратації, в умовах загального зневоднення та закономірність репаративних процесів у період їх реадаптації. Захворювання кісток скелета є найбільш розповсюдженими і найчастіше призводять до інвалідності населення у відносно молодому, працездатному віці а також у віковому аспекті.

Експериментальні дослідження були проведені на 42 статевозрілих білих щурах-самцях, віком - 6 місяців

Адаптованих тварин (група Д1) та неадаптованих щурів (група Д2) піддавали впливу загального зневоднення трьох ступенів (легкого, середнього та важкого). Загальне зневоднення організму моделювали на тваринах за методикою А.Д. Соболевої.

Харчовий раціон тварин складався з висушеного до постійної ваги вівса і абсолютного обмеження води. Адаптованих (група Д1) та неадаптованих (група Д2) щурів, які перенесли загальне зневоднення важкого ступеня, переводили на звичайний харчовий раціон віварію і досліджували реадаптаційні зміни.

Тварин виводили з експерименту під ефірним наркозом методом декапітації з наступним скелетуванням плечових, стегнових і великогомілкових кісток.

Остеометрію проводили за U. Duerst з точністю до 0,01 мм. Вимірювали довжину кістки, ширину проксимального епіфіза, ширину дистального епіфіза, ширину середини діафіза, передньо-задній розмір середини діафіза.

Через один тиждень у період реадаптації в адаптованих статевозрілих тварин вимірювання розмірів довгих кісток вказували на зупинку росту їх в довжину і ширину порівнянно з контролем. Важкий ступінь загального зневоднення негативно впливає на структуру ростових зон довгих кісток, що проявляється значним сповільненням темпів їх росту і у відновний період.

Висновки. 1. Пригнічення росту через 1 тиждень відновного періоду більше виражене у кістках адаптованих експериментальних тварин.

2. Співставлення остеометричних показників дозволили нам ствердити, що через 1 тиждень відновного періоду показники усіх розмірів довгих кісток статевозрілих тварин груп Д1 і Д2 менші відносно контрольних.

**ДОСЛІДЖЕННЯ РЕАКЦІЙ НІТРОГЕНВМІСНИХ ОРГАНІЧНИХ
СПОЛУК З ЕРИТРОЗИНОМ ТА ЇХ ВИКОРИСТАННЯ ДЛЯ
ВИЗНАЧЕННЯ ЛІКАРСЬКИХ СПОЛУК**

Романовська А.О., Вишнікін А.Б., Головка О. Є.

Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара

49010, м. Дніпро, просп. Гагаріна, 72

У зв'язку зі значним розширенням асортименту лікарських засобів на тлі зростаючої конкуренції серед фармацевтичних підприємств постає задача не тільки забезпечити пацієнта якісними, безпечними та високоефективними лікарськими засобами, а ще й зробити їх споживчо привабливими. Останніми десятиріччями значно збільшилася кількість допоміжних засобів у складі лікарських препаратів. Тому дуже важливо визначити кількість головного компоненту в препараті.

Сьогодні широко застосовується спектрофотометричний метод аналізу для визначення фармацевтичних препаратів у їх лікарських формах. Даний метод заснований на вимірюванні інтенсивності світлопоглинання продукту реакції фармацевтичного препарату з барвником, у видимій області спектру.

Важливою аналітичною формою у спектрофотометричному фармацевтичному аналізі залишаються іонно-асоціативні комплексні сполуки (ІА). Вони мають найбільше з можливих забарвлення, а селективність визначення забезпечується правильним вибором аналітичної реакції. Втім і досі головним способом проведення таких визначень залишаються екстракційно-фотометричні методики.

Використання органічних розчинників зараз все більше обмежується і такі методики вже не відповідають жорстким вимогам зеленої аналітичної хімії. Як не дивно, але кількість безекстракційних методик є дуже малою. В цій роботі ми намагалися знайти відповідь чому це відбувається.

Як аналітичну форму ми вибрали ІА, які утворюються між еритрозином та нітрогенвмісними активними інгредієнтами лікарських композицій, здатними до протонування в сприятливих умовах. До роботи було відомо, що представники флуоресцеїнових барвників здатні до утворення ІА, які змінюють своє забарвлення в ході реакції. В нашій лабораторії було показано, що причиною зміни забарвлення є процеси агрегації барвників, які відбуваються внаслідок того, що такі ІА є

малорозчинними. Природне зближення іонів барвника в кристалах осаду сприяє фізичній взаємодії між ароматичними системами барвника внаслідок π - π дисперсійної взаємодії.

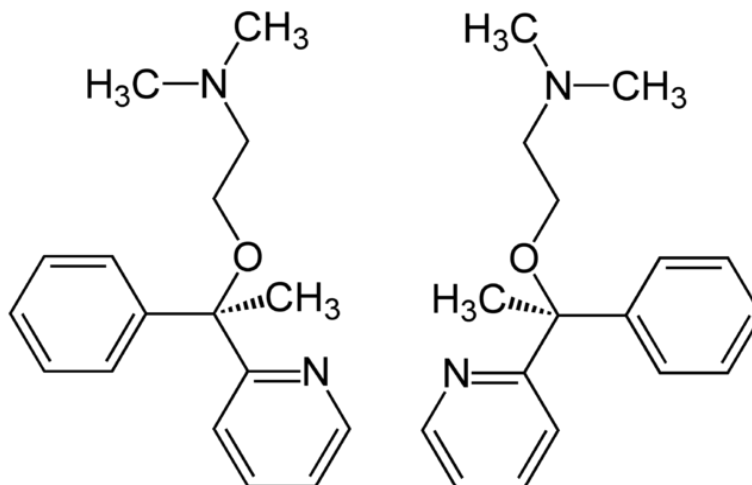


Рис. 1. Структурна формула доксиламін сукцинату

Метою даної роботи було перевірити наскільки широко така реакція може бути застосованою для визначення нітрогенвмісних речовин і розробити для тих лікарських речовин, які виявляться найбільш реакційноздатними, прості, експресні і зелені методики їх визначення.

Для дослідження ми обрали декілька лікарських сполук, а саме: Доксиламін сукцинат (DAS) (Рис. 1), Метоклопрамід, Торасемід. Як реагент використовували еритрозин (ER). На початку досліджень ми проводили якісне дослідження. До розчину нітрогенвмісного лікарського засобу додавали невеликий надлишок еритрозиу. Чітким індикатором цієї реакції є миттєва зміна кольору розчину ER з оранжевого на рожевий.

Встановлено, що за відповідних умов Доксиламін сукцинат утворює малорозчинні ІА з ER. Колір розчину змінюється з оранжевого на рожевий миттєво після додавання DAS. ER має максимум поглинання при 526 нм у водному розчині (рис. 2). Електронний спектр барвника помітно змінюється в реакції з DAS. Поглинання в максимумі смуги зменшується, з'являється нова батохромно зміщена смуга. В якості аналітичної довжини хвилі була обрана довжина хвилі 560 нм, що відповідає максимуму різницевого спектру.

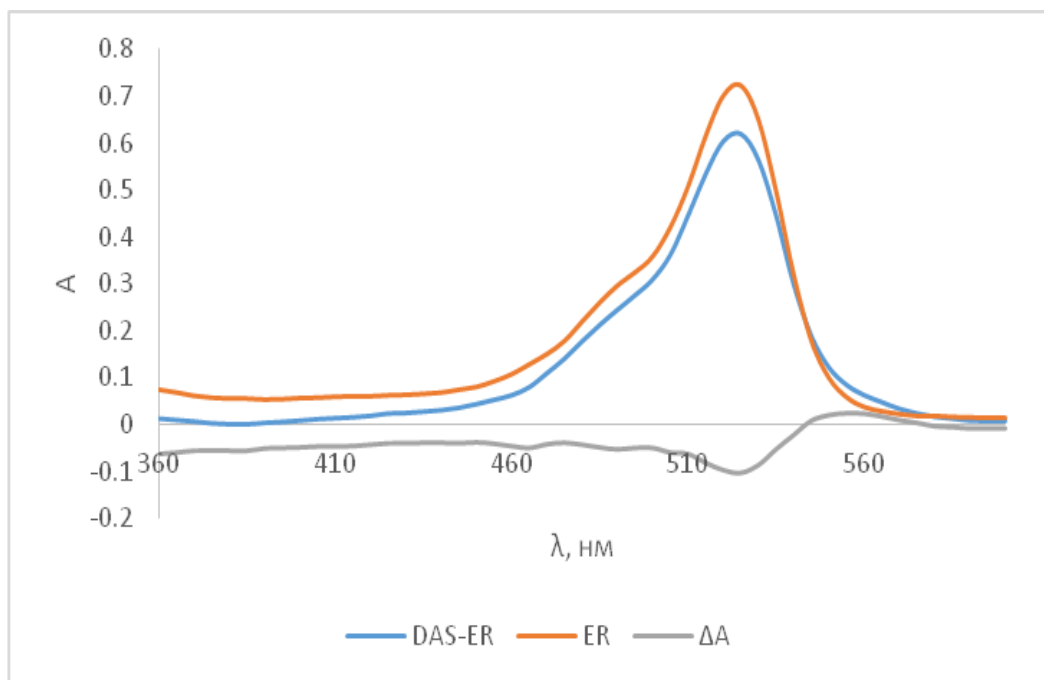
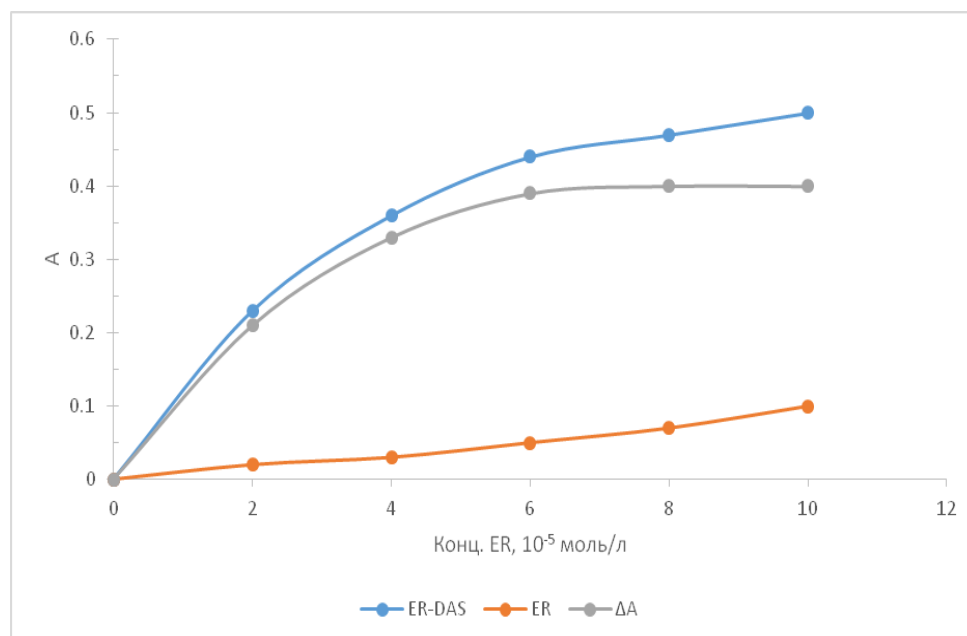


Рис. 2. Спектр поглинання еритрозиу (ER), ІА (DAS-ER) та різницеий спектр (ΔA). $C(ER) = 1,9 \times 10^{-5}$ М, $C(DAS) = 4,5 \times 10^{-5}$ М, $pH = 4$, $l = 0,5$ см

Розчини готувались безпосередньо перед вимірюванням шляхом додаванням 0,58 мл $8,19 \times 10^{-4}$ М еритрозиу, 3 мл $3,8 \times 10^{-4}$ М доксиламіну, 0,1мл ацетатного буферу з pH 4 та доведенням дистильованою водою до мітки.



7. Рис. 3. Вплив концентрації ER на утворення комплексу ІА. $C(DAS) = 2 \times 10^{-5}$ М, $pH = 4$, $l = 5$ см

При оптимізації умов утворення ІА найважливішим виявився вплив концентрації еритрозину (Рис. 3). Видно, що повністю у бік утворення ІА рівновага зміщується лише в доволі великому надлишку еритрозину приблизно при його концентрації 6×10^{-5} М. Дослідження впливу кислотності показало, що як і в роботі [1], максимальне утворення ІА спостерігається при рН біля 4,0.

Тобто оптимальний рН співпадає з максимумом утворення однозарядної аніонної форми еритрозину і підтверджує гіпотезу про утворення ІА складу 1 : 1 з монопротонованою формою DAS. Оскільки розчини еритрозину ми готували на спирті, виявлено його вплив на утворення ІА. При концентрації більше 2% ІА починає руйнуватися.

В роботі показано, що катіонний барвник еритрозин здатний утворювати специфічні ІА. В якості аналітичної довжини хвилі ми використовували максимум інтенсивної батохромно зміщеної смуги, яка приписується смугі агрегованого барвника в конкретному ІА. Доведено, що найважливішою передумовою утворення специфічного ІА є його досить низька розчинність.

Порівняно з класичними підходами, цей метод має багато корисних аналітичних характеристик. Вони прості, швидкі так як реакція утворення ІА протікає дуже швидко та екологічні так як реакції можна проводити без використання органічних розчинників. Реакції утворення специфічних ІА легко автоматизуються. Такі методи показують набагато кращу чутливість, ніж аналогічні існуючі процедури.

Список літератури

1. Hedjazi M., Vishnikin A.B., Balanenko A.D. A green spectrophotometric method for determination of drotaverine hydrochloride in pharmaceutical preparations using formation of ion association complex with erythrosine. J. Chem. Technologies. – 2021. – Vol. 29, № 3. – P. 467-475

**ІДЕНТИФІКАЦІЯ ТА КІЛЬКІСНЕ ВИЗНАЧЕННЯ
СУМАРНОГО ВМІСТУ ВІТАМІНУ D (D₂+D₃)
ІМУНОФЕРМЕНТНИМИ МЕТОДАМИ**

Лінко Т.А. Сидорова Л.П.

*Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара
49010, м. Дніпро, пр-т Гагаріна, 72*

Вітамін D включає групу біоорганічних сполук секостероїдної природи, холекальциферол (вітамін D₃) та ергокальциферол (вітамін D₂), що мають антирахітичну дію. Цей жиророзчинний стероїдний гормон, не залежно від способу надходження в організм (утворюється в шкірі під впливом сонячного світла або надходить з їжею), для перетворення на гормонально-активну форму та прояву біологічних ефектів зазнає двостадійного гідроксилювання. Спочатку в печінці, де піддається гідроксилюванню, утворюючи 25ОНD (основного маркера забезпеченості організму вітаміном D). Далі гідроксилювання відбувається в нирках під дією 25ОНD -1 α -гідроксилази з утворенням 1 α ,25-дигідрокси холекальциферолу.

Протягом останніх десятиліть, у зв'язку зі змінами кліматичних умов, та несприятливими екологічними факторами, у більшості населення світу констатують наявність дефіциту вітаміну D. З огляду на важливу роль вітаміну D у регулюванні життєва важливих процесів в організмі, низький рівень забезпеченості цим вітаміном розглядають як фактор розвитку багатьох хронічних захворювань людини, серед яких серцево-судинні, інфекційні, автоімунні, онкологічні та інші.

Вітамін D існує в двох основних формах: вітамін D₃ (холекальциферол), який утворюється внаслідок перетворення 7-дегідрохолестеролу в епідермісі і дермі людини під впливом сонячного світла і вітаміну D₂ (ергокальциферол), який надходить до організму з

їжею, в основному це риба з високим вмістом жирів (наприклад, лосось, макрель і оселедець), гриби, яєчний жовток і продукти з додаванням вітаміну D. Рецептурні або без рецептурні харчові добавки також є великим джерелом вітаміну D для багатьох людей [1,2].

Вітамін D, утворений в шкірі або, який надійшов до організму з їжею, біологічно неактивний. Він потрапляє до кровообігу, зв'язуючись з вітамін-D-зв'язуючим білком (ВДЗБ), і транспортується в печінку, де піддається гідроксилюванню, утворюючи 25ОН вітамін D. 25ОН вітамін D також циркулює у вигляді комплексу з ВДЗБ.

Потім він метаболізується в нирках ферментом 25 гідроксивітамін D-1 α -гідроксилазою до біологічно активної форми, 1,25 дигідроксивітаміну D. 1,25 дигідроксивітамін D циркулює в концентраціях в 1000 разів нижче, ніж 25ОН вітамін D, і його утворення в нирках строго контролюється рівнем паратиреоїдного гормону в плазмі і рівнем кальцію і фосфору в сироватці. 25ОН вітамін D сироватки є великим циркулюючим метаболітом вітаміну D в організмі і відображає надходження вітаміну D за допомогою шкірного синтезу і через їжу.

З цієї причини концентрація 25ОН вітаміну D в сироватці вважається стандартним клінічним показником вмісту вітаміну D. Так як 25ОН вітамін D в сироватці є сумішшю форм D₂ і D₃, для точності концентрації загального 25ОН вітаміну D слід вимірювати обидві його форми - D₂ і D₃ [3].

Існує консенсус, що загальний 25-ОН-D (25-ОН-D₂ + 25-ОН-D₃) у сироватці крові є хорошим біомаркером статусу вітаміну D [1], і велика кількість доказів свідчить про те, що низький загальний 25-ОН- D корелює з багатьма шкідливими наслідками для здоров'я, включаючи показники переломів кісток, серцево-судинного здоров'я, імунологічного здоров'я, сили опорно-рухового апарату та загальної смертності.

Для визначення вітаміну D в сучасних лабораторіях найчастіше використовують такі методи, як рідинна хроматографія, у поєднанні з тандемною мас-спектрометрією, високоефективна рідинна хроматографія, радіоімунологічне обстеження, хемілюмінесцентне імунологічне визначення та твердофазний імуноферментний аналіз.

Хроматографічні методи порівняно з автоматизованими імуноферментними методами мають більш високу складність, довші за часом проведення та потреби у кваліфікованому персоналі, що зробило їх практично недоступними для деяких лабораторій. Тому автоматизовані аналізи зазвичай вважаються найкращим вибором для лабораторних послуг за умови, що ці методи демонструють задовільну аналітичну продуктивність та оптимальне узгодження з еталонною.

В роботі розглядається Імунологічний аналіз на вільний вітамін D.

Дослідження відноситься до імунологічного аналізу та стосується аналізу зразка крові або компонентів крові на присутність вільного вітаміну D, включаючи метаболіти вітаміну D, 25-гідроксивітамін D або 1,25- дигідроксивітамін D, де вільний вітамін D являє собою циркулюючу, незв'язану фракцію вітаміну D.

Спосіб включає стадії: додавання іммобілізованого зв'язуючого білка або антитіла до 25-(ОН)-вітаміну D у зразок; змішування зразка з розріджувачем, причому зазначений розріджувач містить від 0,1% до 0,25% фторалкільної поверхнево-активної речовини; інкубація зразка протягом періоду часу, достатнього для того, щоб забезпечити зв'язування необхідної кількості вітаміну D із зв'язуючим білком; видалення незв'язаної сироватки та компонентів сироватки шляхом промивання; здійснення аналізу іммобілізованих зв'язувальних білків або антитіл, що містять захвачений вітамін D, пов'язаний з ними, методом конкурентного зв'язування з використанням міченої сполуки вітаміну D; визначення

концентрації міченої сполуки вітаміну D, пов'язаної зі сполучним білком [4].

Дослідження відноситься до застосування фторалкільних поверхнево-активних речовин, переважно перфторокарбоксилатних поверхнево-активних речовин, найбільш переважно перфтороктанової кислоти, як речовина для підвищення розчинності вітаміну D в імунологічному аналізі визначення вільного вітаміну D.

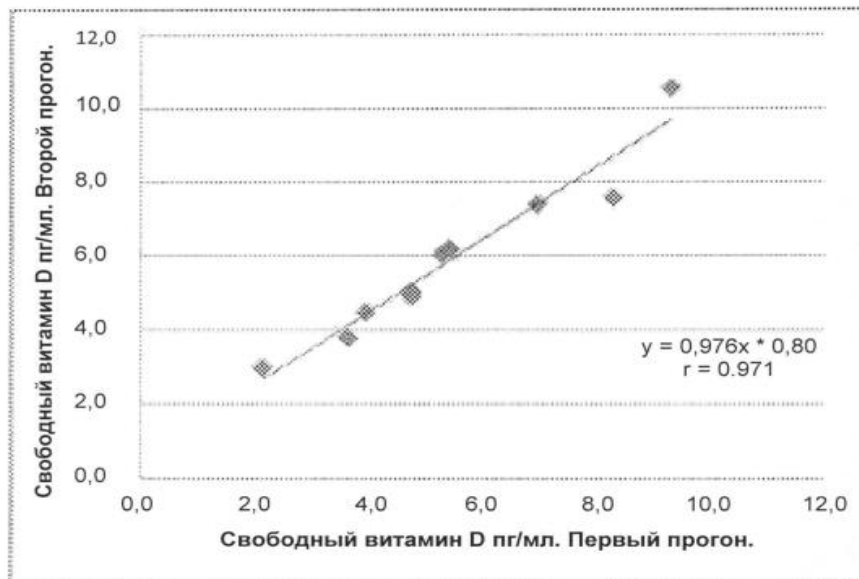


Рисунок 1.1 – Кореляція між концентрацією вільного вітаміну D в першому та повторному аналізі.

На графіку показана кореляція між концентрацією вільного вітаміну D в першому та повторному аналізі. Лінією позначені результати повторної імунокстракції з використанням 0 зразків з різними рівнями вільного вітаміну D. Нахил лінії регресії не відрізняється від одиниці суттєво [4].

Наведене дослідження забезпечує спосіб аналізу фрагмента вітаміну D у зразку, який включає: контакт із зразком, що містить фрагмент вітаміну D, з буфером, який здатний дисоціювати частину вітаміну D від його зв'язуючого білка та/або кислого буфера рН, і, щонайменше, два моноклональні антитіла, які приєднані, наприклад, окремо до поверхні або

частинок, причому одне моноклональне антитіло, або перше антитіло, має специфічну сполучну спорідненість до фрагменту вітаміну D, а інше антитіло має специфічну спорідненість зв'язування до комплексу, що утворюється між першим антитілом та вітаміном D; оцінка зв'язування між зазначеними специфічними антитілами та вказаним фрагментом вітаміну D для визначення наявності, відсутності та/або кількості зазначеного фрагмента вітаміну D у зазначеному зразку [5].

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Vitamin D deficiency / M. F. Holick // *The New England journal of medicine*. – 2007. – Vol. 357, N 3. – P. 266 – 281. – Access mode: doi: 10.1056/NEJMra070553

2. Evaluation, treatment, and prevention of vitamin D deficiency: an Endocrine Society clinical practice guideline / M. F. Holick [et. al.] // *The Journal of clinical endocrinology and metabolism*. – 2011. – Vol. 96, N 7. – P. 1911 – 1930. – Access mode: doi: 10.1210/jc.2011-0385

3. Holick M. F., Garabedian M. Vitamin D: Photobiology, metabolism, mechanism of action and clinical applications / M. F. Holick, M. Garabedian // In: Favus MJ, ed. *Primer on the Metabolic Bone Diseases and Disorders of Mineral Metabolism*. 6th ed. Washington, DC: American Society for Bone and Mineral Research. – 2006. – С. 129 –137.

4. Пат. RU 2592229 С2 Росія, МПК G01N 33/82 (2006.01). Імунологічний аналіз на вільний вітамін D/ Мартенс М. Ф. (NL), Вілтхельмус К. (NL), Парсонс Г. Х. (US), Росмален Ф. М. А. (NL), Свінкелс Л. М. Я. В. (NL); заявник та патентовласник Футуре Діагностік Б. В. (NL) – № 2012141513/15; заявл. 01.04.2011; опубл. 20.07.2016 Бюл. № 20

5. Пат. EP 3491392 B1, G01N 33/82 (2006.01). Способи та склади для аналізу вітаміну D/ Юань Чонг-Шен, Сайда Фахрі Бен (US); заявник та патентовласник Witte, Weller & Partner Patentanwälte mbB Postfach 10 54 62 70047 Stuttgart (DE) – № 17755585.1; заявл. 28.07.2017; опубл. 31.03.2021 Bulletin 2021/13.

ІДЕНТИФІКАЦІЯ ТА КІЛЬКІСНЕ ВИЗНАЧЕННЯ ФУРФУРОЛУ ТА ОКСИМЕТИЛФУРФУРОЛУ В ХАРЧОВИХ ПРОДУКТАХ

Громова Д.С., Сидорова Л.П

Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара

49010, м. Дніпро, просп. Гагаріна, 72

gromovad815@gmail.com

Оксиметилфурфурол – це органічна речовина, що утворюється при виробництві, тривалому зберіганні або в результаті високотемпературної переробці соків і сокової продукції, кондитерської продукції і в тому числі меду. З хімічної точки зору – продукт хімічного руйнування цукрів (рис.1.1)[1].

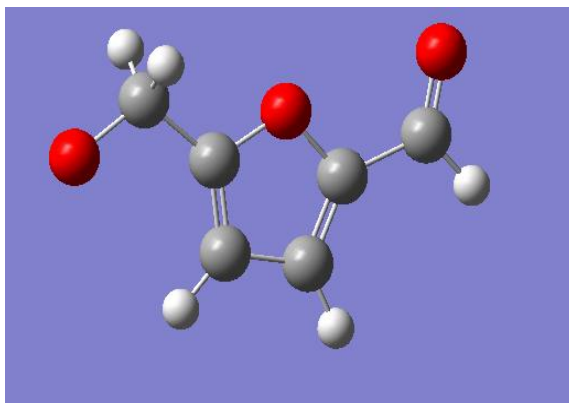


Рисунок 1.1 - Структурна формула оксиметилфурфуролу.

Хоча процеси зміни цукрів при нагріванні в залежності від перерахованих вище факторів і при сукупності цих факторів будуть відбуватися не зовсім однаково для різних цукрів, проте основну схему хімічних змін моносахарів, і зокрема глюкози при її нагріванні в кислому або нейтральному середовищі, можна представити в наступному вигляді: нагрівання глюкози викликає спочатку дегідратацію цукру (відщеплення від глюкози однієї або двох молекул води). При цьому утворюються ангідриди глюкози, реакційно здатні сполуки, які можуть з'єднуватися або один з одним або з нормальною молекулою цукру і утворювати так звані продукти конденсації (реверсії). При тривалому тепловому впливі відщеплюється третя молекула води і утворюється оксиметилфурфурол, який при подальшому нагріванні може розпадатися з руйнуванням вуглеводного скелета і утворенням мурашиної і леулінової кислоти.

У загальному вигляді схему хімічних змін сахарози можна представити в наступному вигляді(рис.1.2):

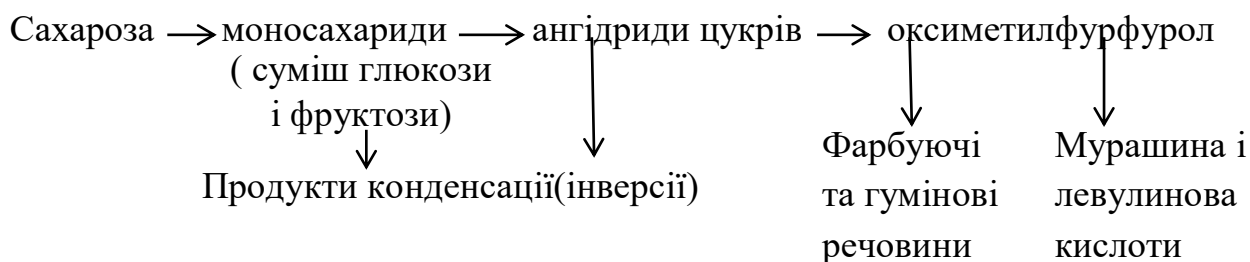


Рисунок 1.2 – Схема хімічних змін сахарози

Присутність оксиметилфурфуролу в харчових продуктах небажано з наступних причин: фуранові похідні є отрутами, великі дози їх викликають судоми і параліч, малі дози пригнічують нервову систему. Ці прості і комплексні сполуки організм людини не може метаболізувати, що призводить до накопичення цих сполук в печінці людини, а можливо і до порушення біохімічних процесів в організмі [2,3].

Оксиметилфурфурол та фурфурол відноситься до так званого індикатора якості і безпеки ведення технологічного процесу, дотримання правил зберігання, і навіть може свідчити побічно про фальсифікацію харчової продукції. Токсична дія оксиметилфурфуролу та фурфуролу обґрунтовує необхідність нормування його максимальної кількості в продуктах, особливо продуктах дитячого харчування.

Метою роботи був вибір методики визначення оксиметилфурфуролу та фурфуролу у харчових продуктах.

Вміст фурфуролу та оксиметилфурфуролу можна визначати гравіметричним, титриметричним, спектрофотометричним, хроматографічним методами, а також ідентифікувати за допомогою якісного аналізу. Для спектрофотометричного визначення оксиметилфурфуролу використовується тест Селіванова з розчинами Карез I (15% гексаціаноферату калію, мас./об.) та Карез II (30% дегідрату ацетату цинку, мас./об.) та процедури центрифугування для подальшого аналізу при 465нм. У методі Вінклера для визначення оксиметилфурфуролу використовується розчину п-толуїдину з барбітуровою кислотою, вимірювання абсорбції проводиться при 550 нм [4].

В роботі запропонована методика визначення оксиметилфурфуролу та фурфуролу з антраніловою кислотою. Метод заснований на вимірюванні інтенсивності забарвлення фурфуролу та його похідного оксиметилфурфуролу з антраніловою кислотою у водній витяжці з проби продукту при довжині хвилі $\lambda = 530$ нм. Побудовані графіки залежності оптичної густини від кількості фурфуролу (рівняння реакції $y = 0,0285x + 0,004$, коефіцієнт кореляції $R^2 = 0,9996$. Діапазон лінійності градувальної

залежності оптичної густини від вмісту оксиметилфурфурола становить 1 - 15 мг/кг. Кількісне визначення вмісту фурфуролу в зразках меду проводили методом градуювального графіку, та методом добавок.

Література

1. Влияние фурфурола на точность определения 5-гидроксиметилфурфурола / Е.Д. Рожков, А.А. Печенина, М.А. Апарнева [и др.] // Ползуновский вестник. – 2011. – №14. – С. 65 – 67.
2. Комплексный подход к оценке натуральности окрашенных соков / К.И. Эллер, В.В. Пименова, Л.Г. Левин [и др.] // Вопросы питания. – 2003. – Т.72, №2. – С. 28 – 35.
3. Зерщикова Т.А. Эколого-гигиеническая оценка синтетических и натуральных красителей в разнообразных напитках / Т.А. Зерщикова, Л.П. Флоринская // Успехи современного естествознания. – 2010. – №3. – С. 124 – 125.
4. Besir, Aysegul (2020). A novel spectrophotometric method based on Seliwanoff test to determine 5-(Hydroxymethyl) furfural (HMF) in honey: Development, in house validation and application / Yazici, Fehmi; Mortas, Mustafa; Gul, Osman // LWT – Food Science and Technology/ - 2020. - 110602 –. doi:10.1016/j.lwt.2020.110602

**ВПРОВАДЖЕННЯ МЕТОДІВ АНАЛІЗУ ПРИ ВИЗНАЧЕННІ ЙОНІВ
КАЛЬЦІЮ В ФАРМАКОПЕЙНИХ ПРЕПАРАТАХ У ВИКЛАДАННІ
ДИСЦИПЛІНИ «АНАЛІТИЧНА ХІМІЯ»**

Крилкіна А.І., Хмельникова Л. І.

Дніпровський державний медичний університет

м. Дніпро, вул. Володимира Вернадського, 9

Кальцій знаходиться в кожній клітині тіла людини, загальний вміст його в організмі становить близько за $w(\text{Ca}) = 1,4\%$ (від загальної маси тіла). Добова потреба організму в кальції 0,8-0,9 г, але його фізіолого-біохімічна дія значна. Крім того, кальцій є незамінним елементом, який не може бути синтезований організмом людини, але існує у вигляді їжі або ліків. Всмоктування кальцію залежить від багатьох причин, зокрема основним регулятором засвоєння кальцію є вітамін Д. При нестачі цього вітаміну всмоктування кальцію зменшується. Кальцій є основним компонентом кісткової тканини та зубів у вигляді карбонатів та фосфатів. Вміст кальцію в кістках перебуває у тісній залежності від наявності солей фосфорної кислоти. Від кількісного вмісту кальцію в скелеті залежить його твердість, зростання та мінералізація кістки.

Іони кальцію беруть участь у передачі нервових імпульсів, скороченні м'язів, регулюванні роботи серця, у згортанні крові [1]. Оскільки кальцій знижує збудливість клітин ЦНС, його зменшення в організмі супроводжується порушенням нервової системи (тетанія). Іони кальцію сприяють виділенню ацетилхоліну (антагоніст магнію). Кальцій входить до складу деяких ферментних систем (наприклад, лецитинази) та впливає на їхню активність. Іони кальцію впливають на кислотно-лужну рівновагу, функцію ендокринних залоз (особливо паращитовидних), мають протизапальну та десенсибілізуючу дію. Іони кальцію знаходяться в біологічному антагонізмі з іонами натрію, калію та магнію.

Тому підтримання балансу метаболічного процесу організму і повне забезпечення потреби в кальції є одним із факторів, що знижують ризик виникнення багатьох захворювань [4]. Відомо, що і дефіцит, і надлишок йонів кальцію в організмі призводить до різних захворювань. При нестачі кальцію використовуються лікарські препарати, що містять сполуки кальцію: оксид, хлорид, карбонат, цитрат, аспартат, глюконат, доломіт, гліцерофосфат та інші [2]. Йони кальцію також входять до складу вітаміну В₁₅. При вивченні процесів мінерального обміну в живому організмі застосовуються радіоактивні ізотопи кальцію [1]. Препарати, що містять йони кальцію використовуються для лікування алергічних захворювань, зменшують підвищену проникність судин і мають протизапальну дію, лікують хвороби, пов'язані з нестачею кальцію. Ліки, що містять кальцій, застосовують як кровоспинний засіб, для поліпшення діяльності серцевого м'язу, як протиотрути при отруєнні солями магнію, для стимулювання пологів. До лікарських препаратів, що містять кальцій, відносяться також гіпс, що використовують в хірургії для гіпсових пов'язок, крейду, яку вживають при підвищеній кислотності шлункового соку і для приготування зубного порошку. Одним зі фармакопейних препаратів є кальцій хлорид. Кальцій хлорид зменшує проникність судин, має протиалергічну та протизапальну дію. Його застосовують при лікуванні алергічних захворювань (кропивниці), променевої хвороби, ревматизмі, кровотечах, переломах кісток, шкірних захворюваннях, а також при отруєннях солями магнію, щавлевою кислотою, солями фторидної кислоти, свинцем, ртуттю, фосгеном. Тому для визначення вмісту йонів кальцію було взято цей лікарський препарат. Завданням дослідження було визначення справжності препарату та ступеня його чистоти. Згідно з фармакопейними статтями, що контролюють якість лікарських засобів, уміст хлориду кальцію в лікарському препараті не повинен бути менше, ніж 98%. Також не допускається наявність домішок, солей заліза,

алюмінію, барію, ортофосфатів. Солі магнію і сульфати є допустимими домішками і не впливають на якість лікарського препарату хлориду кальцію [5]. Визначення справжності лікарського препарату хлориду кальцію засноване на реакції іона кальцію з оксалатом амонію. Білий кристалічний осад, що утворюється в результаті проведення реакції, нерозчинний в оцтовій кислоті, але добре розчинний у мінеральних кислотах. Іони магнію досить часто присутні у розчині лікарського препарату, одночасно з іонами кальцію, тому реакцію слід проводити за участю амоніачного буферного розчину [2, 3]. Для кількісного визначення хлориду кальцію в лікарському препараті використовували комплекснометричне титрування з індикатором хромовий темно-синій. Титрували розчином трилону Б до переходу вишнево-червоного забарвлення розчину в синьо-бузковий. Результати дослідження вказують, що вміст кальцію в лікарському препараті (розчин хлориду кальцію) знаходиться в межах норми.

Список використаної літератури

1. Боєчко Ф.Ф., Боєчко Л.О. Основні біохімічні поняття, визначення і терміни. – К., 1993;
2. Державна Фармакопея України. Державне підприємство «Український науковий фармакопейний центр якості лікарських засобів». – 1-е вид. – Доповнення 3. Харків : Державне підприємство «Український науковий фармакопейний центр якості лікарських засобів», 2009. – 280 с.
3. Державна Фармакопея України. Державне підприємство «Науково-експертний фармакопейний центр». 1-е вид. Доповнення 2. Харків : Державне підприємство «Науковоекспертний фармакопейний центр», 2008. – 548 с.
4. Медична хімія: Підр. для вузів / В.О. Калібабчук, Л.І. Грищенко, В.І. Галинська та ін.; Під ред. В.О. Калібабчук. – К. : Інтермед, 2006 – 460с.
5. Ніжник Г.П. Фармацевтична хімія: підручник. Київ : Медицина, 2010. – 352 с.

АНАЛІЗ БІНАРНИХ СУМІШЕЙ ХІМІЧНИМ ВАРІАНТОМ МЕТОДУ БАГАТОКРАТНИХ ДОБАВОК N-POINT

Бондаренко М., Дралевський М.С., Жданкін А.Є., Вишнікін А.Б.

Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара

49010, м. Дніпро, просп. Гагаріна, 72

Вступ. Метод багатократних добавок N-Point широко використовується в різних галузях, таких як хімія, біохімія, екологічна наука та харчова наука для кількісного аналізу сумішей. Це пояснюється тим, що метод є відносно простим, економічним і може давати точні результати при використанні відповідних стандартів та аналітичних технік. Крім того, метод многократних добавок N-Point може легко застосовуватись до різних аналітичних технік, таких як хроматографія, спектроскопія та електрохімія. Він також може бути використаний для аналізу як бінарних сумішей, так і більш складних сумішей.

Важливою проблемою спектрофотометричного аналізу є індивідуальне визначення окремих сполук у бінарних сумішах. В тому випадку коли спектри поглинання двох сполук повністю перекриваються, визначення стає можливим тільки в тому випадку коли спектри обох сполук є відомими. Одним з найкращих сучасних методів аналізу таких сумішей є метод багатократних добавок N-point. Як і в інших таких методах визначення є можливим тільки в тому разі коли виконуються певні умови. В методі N-point в спектрі однієї з сполук мають бути дві довжини хвиль при яких оптична густина цієї сполуки є однаковою. Є багато ситуацій в аналізі коли спектр другої сполуки невідомий. Для цього випадку існуючі розрахункові методи є непридатними. Нещодавно був запропонований хімічний варіант методу N-point.

По-перше, новий метод було використано для визначення суми поліфенолів у присутності інтенсивно забарвлених сполук. Дієвість методу продемонстрована також на прикладі аналізу суміші органічних харчових барвників: E110 та E124. Цей підхід можна використати при аналізі багатьох сумішей харчових добавок та пігментів рослинного походження. Так, для багатьох рослин є характерним інтенсивний колір який обумовлено присутністю в них антоціанів (представників особливого класу поліфенольних сполук). Визначення поліфенолів у таких об'єктах аналізу є великою проблемою. Важливо також те що визначення поліфенолів означає також визначення такого важливого параметру якості продуктів харчування, як антиоксидантна

XXI Всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань сучасної хімії, Дніпро, 22-25 травня 2023 р.

активність. Як реагент для визначення суми поліфенолів було використано 18-молібдодифосфорний гетерополікомплекс. Реакційна здатність цього реагенту по відношенню до поліфенолів була досліджена на прикладі одночасного визначення рутину і галової кислоти.

Запропонований метод вперше дозволив визначати представники одного класу поліфенольних сполук у присутності сполук іншого класу. Показано, що флавоноїди приблизно однаково реагують з 18-МФК при рН 7,4 та 9,5. В той же час реакційна здатність інших фенольних сполук (катехинів або похідних галової кислоти) при цих рН сильно відрізняється.

Найбільша перевага Н-point полягає в тому, що він може враховувати невірну помилку, що виникає внаслідок наявності пропорційної систематичної похибки і дає можливість визначити як концентрацію аналіту, так і інтерференту.

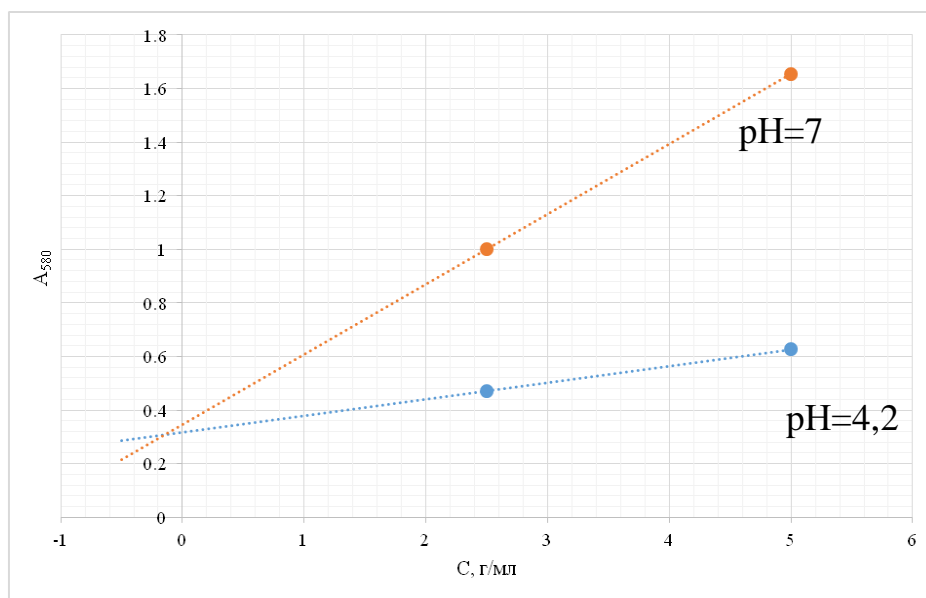


Рисунок 1 – Результати отримані при використанні хімічного варіанту методу Н-Point при аналізі суміші барвників

Як видно з рис. 1, метод дає правильні результати. Криві пересікаються у точці, яка відповідає концентрації добавки 0 мл, що відповідає очікуваному, а оптична густина відповідає значенню 0,3, яке як було показано, відповідає внеску барвника астразонового червоного в оптичну густина суміші.

В результаті систематичного вивчення особливостей взаємодії 18-МФК з фенольними сполуками встановлено, що 18-МФК в порівнянні з іншими реагентами є більш сильним окисником по відношенню до фенолів, інтервал оптимальних значень кислотності для визначення поліфенолів знаходиться в області рН = 7,0-9,5. Вміст

XXI Всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань сучасної хімії, Дніпро, 22-25 травня 2023 р.

поліфенолів, знайдений з 18-МФК, знаходиться в інтервалі концентрацій, близький до літературних даних за умови використання одного і того ж самого стандарту. Така ж відповідність спостерігається, якщо у якості стандарту застосувати рутин або галову кислоту.

При використанні 18-МФК стає можливим роздільно визначити поліфеноли та більш активні відновники шляхом варіювання рН. Методи з 18-МФК розроблені для визначення поліфенолів при спільній присутності у лікарських препаратах на основі рослинної сировини, лікарських рослинах, фруктах, чаях, у свіжовиготовлених соках овочів і фруктів. У порівнянні з іншими реагентами методи характеризуються меншою тривалістю визначення, у ряді випадків більш високою чутливістю та набагато меншим впливом відновників нефенольної природи.

Також нами змодельовано хімічну бінарну систему двох барвників E110 та E124 за умов різних значень рН методом Н-point. Вимірювання проводились при різних значеннях рН, які відповідали різним формам барвників. У лужному середовищі обидва барвники змінюють спектри поглинання, причому доволі синхронно. Вимірювання аналітичного сигналу барвників проводилось при таких довжинах хвиль – 430 нм, 440 нм, 478 нм, 515 нм, 530 нм, 535 нм, при рН = 12,0 та рН = 6,0.

Дані дослідження дозволяють оцінити вплив барвників при їх спільній присутності та дозволяють визначити досліджувану речовину, мінімізуючи вплив на неї інших кольорових речовин. Метод багатократних добавок Н-Point є ефективним і зручним методом для кількісного аналізу сумішей. Цей метод є універсальним і може бути застосованим для аналізу різноманітних типів зразків, включаючи біологічні, харчові та навколишні зразки.

Особлива перевага методу полягає в тому, що він є простим у застосуванні, ефективним та відносно недорогим. Метод може забезпечити точні результати при правильному використанні стандартних розчинів та аналітичних технік. Метод багатократних добавок Н-Point є корисним і надійним варіантом для кількісного аналізу складних сумішей, особливо при обмежених ресурсах та складних матрицях зразків, які можуть спричиняти перешкоди в хімічному аналізі.

ЗАСТОСУВАННЯ СУЛЬФОФТАЛЕЇНІВ ДЛЯ СТВОРЕННЯ ТЕСТ-СИСТЕМ ДЛЯ АНАЛІЗУ НАТАМІЦИНУ

Нестеров А.М., Українська Д.Е., Жук Л.П.

Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара

49010, м. Дніпро, просп. Гагаріна, 72

zhukl@ukr.net

Застосування натаміцину, як антибактеріального засобу широкого спектра дії, відомо не тільки в медичній сфері. Сьогодні це ефективний консервант у харчовій промисловості (харчова добавка E235), що додають для запобігання росту плісняв та дріжджів на харчових продуктах та напоях. Застосування Натаміцину не викликає зміни поживної цінності, зовнішнього вигляду, смаку та структури харчових продуктів, а також не проникає всередину ковбас чи сиру і не виявляє активності по відношенню до корисних бактерій [1]. Обробка натаміцином посівного зерна, ферментованого м'яса, кисломолочних продуктів значно подовжує їх строк зберігання. Раніше природний консервант антимікотичної дії вважався нетоксичним, однак, доведено його мутагенну дію і у ряді країн застосування натаміцину як харчової добавки заборонене. Методи контролю кількісного вмісту натаміцину, як у лікарських засобах, так і у харчових продуктах, тривалі і високовартісні, потребують спеціального обладнання та навченого персоналу і не забезпечують експресності. Пошук шляхів простого та доступного визначення кількісного вмісту натаміцину в лікарських препаратах та продуктах харчування визначає актуальність дослідження. Цікавим вважається створення тест-методик на основі отримання забарвлених аналітичних форм натаміцину за допомогою органічних реагентів та їх застосування в візуальному кольориметричному аналізі [2]. Створені цифрові програми для кількісної обробки отримуваних скануванням або фотографуванням даних.

Спектрофотометрично вивчено поведінку барвників сульфоталеїнового ряду – бромтимолового синього (БТС), бромкрезолового пурпурного (БКП), крезолового червоного (КЧ) та фенолового червоного (ФЧ) (рис.1).

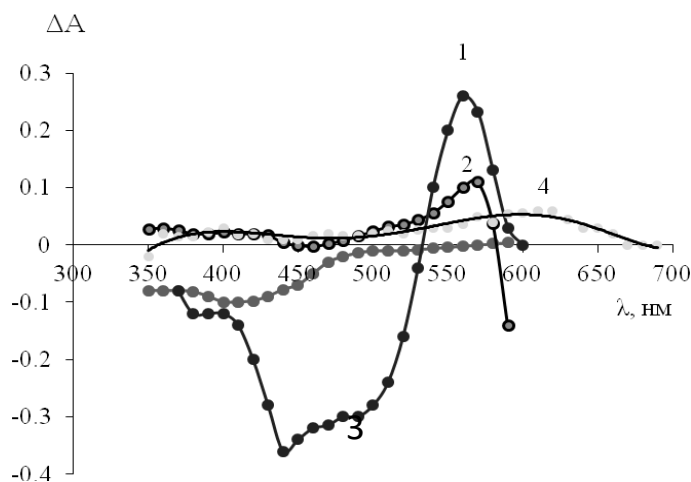


Рис. 1 – Різницеві спектри барвника та двокомпонентної системи для ФЧ (1), БКП (2) при рН 6 та КЧ (3) і БТС (4) при рН 8. $C_{\text{ФЧ}} = 1 \cdot 10^{-5}$ моль/л, $C_{\text{КЧ}} = 3,2 \cdot 10^{-5}$ моль/дм³, $C_{\text{БКП}} = 2 \cdot 10^{-6}$ моль/дм³, $C_{\text{БТС}} = 2 \cdot 10^{-5}$ моль/л, $C_{\text{натаміцину}} = 1,62 \cdot 10^{-6}$ моль/дм³; СФ-26; $l = 1,0$ см

Зміни, відзначені в різницевих спектрах (рис.1), свідчать про утворення йонних асоціатів (ІА). Для системи КЧ-натаміцин різниця у світлопоглинанні сильніша у діапазоні 400 нм ($\Delta A = -0,10$), для БКП-натаміцин – при 590 нм ($\Delta A = -0,11$), а для БТС-натаміцин – при 610 нм ($\Delta A = -0,125$). Найпомітніші зміни відзначені у ІА ФЧ-натаміцин, у яких зміна забарвлення відбувається від 440 нм ($\Delta A = -0,36$) до 570 нм ($\Delta A = 0,232$). Характерно, що величина ΔA приблизно однакова для ІА барвник-натаміцин з різними за полярністю і локалізацією замісниками реагента, тоді як у найпростішого за будовою фенолового червоного взаємодія виражена найсильніше. Для ІА натаміцину з ФЧ спостерігається суттєве

зростання оптичної густини, а БТС дає контрастну зміну забарвлення, що також перспективно для створення тест-системи.

Знайдені оптимальні умови утворення йонних асоціатів (ІА) барвник натаміцин (табл. 1) [3, 4].

Таблиця 1 – Оптимальні умови утворення ІА барвник – натаміцин

Барвник	рН/ буферний розчин	λ , нм	$\Delta\lambda$, нм	$\varepsilon \cdot 10^{-4}$, л·моль ⁻¹ ·см ⁻¹	Інтервал лінійності графіка, мг/л
ФЧ	6,0/боратний	440	10	22,22	0,011- 0,831
КЧ	8,0/-	410	30	2,47	-
БКП	6,0/ацетатний	590	10	4,32	0,022-0,087
БТС	8,0/ ацетатний	440	2-5	1,54	0,108-0,532

З табл. 1 видно, що при додаванні натаміцину в розчини ФЧ при рН 6,0 спостерігається суттєва відмінність від інших систем інтенсивності забарвлення.

При рН 8,5 спостерігаємо різке зростання поглинання при 560 нм, яке супроводжується невеликим (10 нм) батохромним зсувом та одночасне зменшення поглинання при 440 нм з незначним (10 нм) гіпсохромним зсувом смуги поглинання, що підтверджує взаємодію фенолового червоного з натаміцином та утворення ІА .

Аналіз вивчених систем свідчить, що аналітичні форми, отримані взаємодією ФЧ та БТС з натаміцином, можуть бути покладені в основу розробки кольористичної тест-методики визначення вмісту натаміцину в актуальних об'єктах.

Цікавість для розробки тест-методик викликає також можливість модифікації властивостей як сорбентів, так і ІА, шляхом застосування поліелектролітів.

Перелік посилань :

1. Баланенко А.Д. Взаємодія бромкрезолового пурпурного з натаміцином та флокулянтом ФО 4800 / А.Д. Баланенко, Л.П. Жук, І.О. Могильна // Матеріали XIX Всеукраїнської конференції молодих вчених та студентів з актуальних питань сучасної хімії. – Дніпро, ДНУ –17.05-20.05.2021. – С. 6 – 10.
2. Золотов Ю.А. Химические тест-методы анализа / Ю.А. Золотов, В.М. Иванов, В.Г. Амелин. – М.: Едиториал УРСС, 2002. – 304 с.
3. Баланенко А.Д. Взаємодія крезолового червоного та бромкрезолового пурпурного з натаміцином / А.Д. Баланенко, Л.П. Жук, Н.М. Смітюк, І.О. Могильна // Матеріали XX Всеукраїнської конференції молодих вчених та студентів з актуальних питань сучасної хімії. – Дніпро, ДНУ –16.05-19.05.2022. – С. 9 – 12.
4. Баланенко А.Д. Вибір барвника для спектрофотометричного визначення кількісного вмісту натаміцину / А.Д. Баланенко, Л.П. Жук, Н.М. Смітюк, І.О. Могильна // Матеріали I Міжнародної наукової конференції «Теоретичні та експериментальні аспекти сучасної хімії та матеріалів ТАСХ-2022», що присвячена 100-річчю Дніпровського державного аграрно-економічного університету. Дніпро. – 20.05.2022. – Дніпро: “Середняк Т.К.”, 2022. – С. 97-100.

**МОДИФІКУЮЧА ДІЯ ПОЛІЕЛЕКТРОЛІТІВ У РЕАКЦІЯХ
ВИЗНАЧЕННЯ АЗОТОВМІСНИХ ОРГАНІЧНИХ СПОЛУК У
ВИГЛЯДІ ЇХ ІОННИХ АСОЦІАТІВ З ОРГАНІЧНИМИ
БАРВНИКАМИ**

Чернявська О.Ю., Вишнікін А.Б.

Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара,

м. Дніпро, просп. Гагаріна, 72

До складу лікарських препаратів часто входять активні речовини, які мають у своєму складі вторинні, третинні, первинні аміногрупи та інші азотовмісні групи, які здатні до протонування в області рН, де може відбуватися їх взаємодія з аніонними барвниками. Прикладом таких сполук є лоратадин, мебеверин, левофлоксацин. Такі речовини здатні протонуватися, набуваючи позитивного заряду.

Позитивно заряджені азотовмісні органічні сполуки здатні утворювати іонні асоціати (ІА) з аніонними органічними барвниками (ОБ). Ця взаємодія покладена в основу спектрофотометричних методик аналізу фармпрепаратів, що містять речовини з аміногрупами.

Проте при використанні таких аналітичних форм виникають певні труднощі. Для контрастної зміни забарвлення розчину необхідно, щоб рН розчину був таким, при якому аміногрупа була б протонованою. У той же час, оскільки більш стійкий ІА утворюється з однозарядною формою барвника, ОБ повинен знаходитися в двозарядній формі. Тому створення умов, у яких одночасно барвник перебуває у діаніонній формі, а лікарська сполука залишається протонованою, здатне призвести до контрастних змін у спектрах поглинання.

У роботі на прикладі взаємодії бромкрезолового пурпурного (БКП) з лоратадином, мебеверином, левофлоксацином показано, що визначення азотовмісних органічних сполук може відбуватися за рахунок зміщення кислотно-основної рівноваги барвника. Встановлено, що поліелектроліти (ПЕ) здатні позитивно впливати на утворення ІА ОБ з азотовмісними органічними сполуками. Модифікація ПЕ призводить до зміщення рК барвника в більш кислу область, де азотовмісна сполука вже протонувана. Це створює умови для більш контрастної зміни забарвлення і дозволяє використовувати набагато більше барвників для визначення азотовмісних органічних

XXI Всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань сучасної хімії, Дніпро, 22-25 травня 2023 р.

сполук, значно розширити кількість азотовмісних сполук, які можна визначати наступним чином.

Визначено оптимальні умови (рН, концентрації ОБ, ПЕ) взаємодії БКП із лоратадином, мебеверином, левофлоксацином. Розроблено спектрофотометричні методики визначення азотовмісних органічних сполук у лікарських препаратах. Визначення не заважають компоненти лікарських засобів. Результати визначення наведено у таблиці.

Таблиця Результати кількісного визначення азотовмісних органічних сполук у лікарських препаратах (n = 3, P = 0,95)

Знайдено в препаратах, мг		Заявлено виробником в препаратах, мг
Метод градуювального графіка	Метод добавок	
$(\bar{C} \pm \Delta)$, мг / Sr	$(\bar{C} \pm \Delta)$, мг / Sr	
Лоратадин («Лоратадин», ПАТ «Фармак»)		
$(9,67 \pm 0,37) / 0,02$	$(9,76 \pm 0,62) / 0,03$	10
Мебеверин («Дуспалгин», Solvay Pharmaceuticals B.V.)		
$(198,67 \pm 10,5) / 0,03$	$(200,9 \pm 8,7) / 0,03$	200
Левофлоксацин («Левофлоксацин», АО Вертекс)		
$(249,6 \pm 15,1) / 0,02$	$(250,9 \pm 17,5) / 0,03$	250

Секція

**ОРГАНІЧНА ТА
ФАРМАЦЕВТИЧНА
ХІМІЯ**

**Керівник: доц., канд. хім. наук Аніщенко Андрій
Олександрович**

**Секретар: ст. наук. спів. Гапонов Олександр
Олексійович**

**ДОСЛІДЖЕННЯ РЕГІОСЕЛЕКТИВНОСТІ ЕЛЕКТРОФІЛЬНОЇ
ГЕТЕРОЦИКЛІЗАЦІЇ 3-АЛІЛ-2-ТІОКСО-7-ТРИФЛУОРОМЕТИЛ-
2,3-ДИГІДРОХІНАЗОЛІН-4(1H)-ОНУ**

Кут Д.Ж., Кут М.М., Онисько М.Ю.

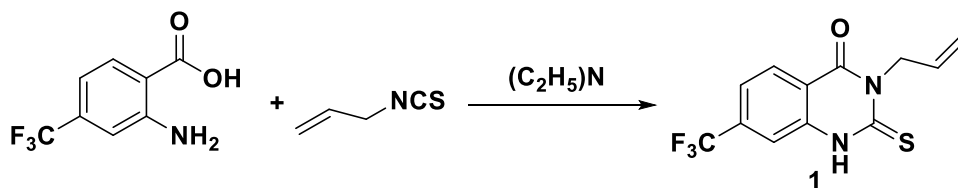
Державний вищий навчальний заклад

«Ужгородський національний університет»

diana.kut@uzhnu.edu.ua

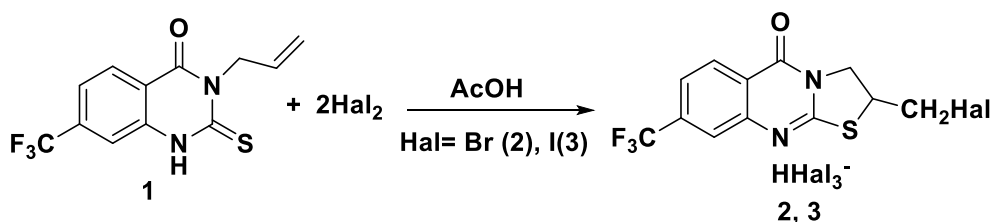
Хіназоліни є класом конденсованих гетероциклів, які становлять значний інтерес через різноманітний спектр їх біологічних властивостей. Багато заміщених похідних хіназоліну проявляють цілу низку біоактивностей, такий як протималарійна, протипухлинна, протимікробна, протигрибкова, противірусна, протипротозойна, протизапальну, сечогінну, міорелаксуючу, протитуберкульозну, протисудомну, акарицидну та багато інших біологічних активностей. Хіназолінові похідні використовуються для синтезу різних синтонів в синтетичній органічній хімії, а також вони присутні в молекулах різних ліків. Одним із найефективніших та зручних методів одержання конденсованих хіназолінів є електрофільна внутрішньомолекулярна циклізація з використанням різних електрофільних агентів. Метою даної роботи являється синтез біологічно перспективних конденсованих хіназолінів та дослідження регіохімії процесу електрофільної циклізації 3-аліл-2-тіоксо-7-трифлуорометил-2,3-дигідрохіназолін-4(1H)-ону під дією галогеновмісних електрофілів.

Вихідний 3-аліл-2-тіоксо-7-трифторометил-2,3-дигідрохіназолін-4(1H)-он **1**, одержано нагріванням 4-трифторометилантранілової кислоти з аліл ізотіоціанатом в середовищі триетиламіну.

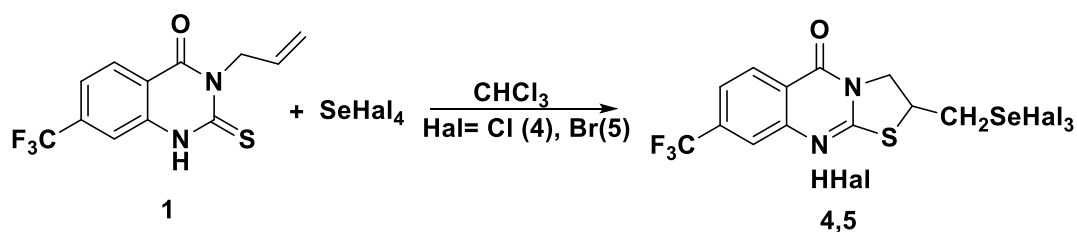


3-Аліл-2-тіоксо-7-трифторометилхіназолін-4-он **1** має декілька нуклеофільних центрів для атаки електрофільних реагентів - кратний зв'язок алкенільного замісника, екзоциклічні атоми кисню та сульфуру, що дає можливість дослідити регіохімію процесу електрофільної внутрішньомолекулярної циклізації. Важливим є також вивчення впливу електроноакцепторної трифторометильної групи на процес циклізації. Як галогеновмісні електрофільні реагенти використано галогени (бром, йод), тетрагалогеніди халькогенідів та арилтелуртрихлориди.

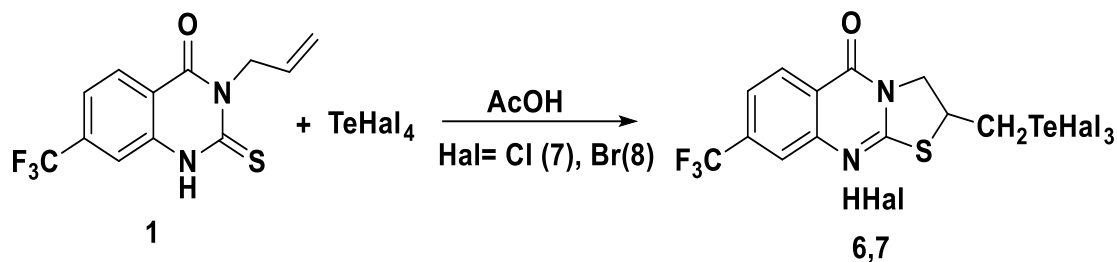
Перемішування N-аліл-2-тіоксо-7-трифторометилхіназолін-4-ону **1** з двократним надлишком галогену (бром 6 годин, йод 24 години) в льодяній оцтовій кислоті при кімнатній температурі приводить до регіоселективного анелювання тіазолінового циклу до остова хіназоліну з утворенням лінійних тіазолохіназолінів **2, 3**. Утворення тіазолохіназолінів лінійної будови **2, 3** підтверджено спектрами ЯМР та ІЧ-спектрами. Циклізація на атом сульфуру з утворенням продуктів циклізації лінійної будови підтверджується наявністю інтенсивних смуг поглинання карбонільної групи в ІЧ-спектрі сполук **2, 3** при 1675 та 1721 cm^{-1} відповідно. Дані елементного аналізу сполук **2, 3** вказують на утворення 2-(галогенометил)-8-(трифторометил)-2,3-дигідро-5H-[1,3]тіазоло[2,3-b]хіназолін-5-ону **2,3** у вигляді солей.



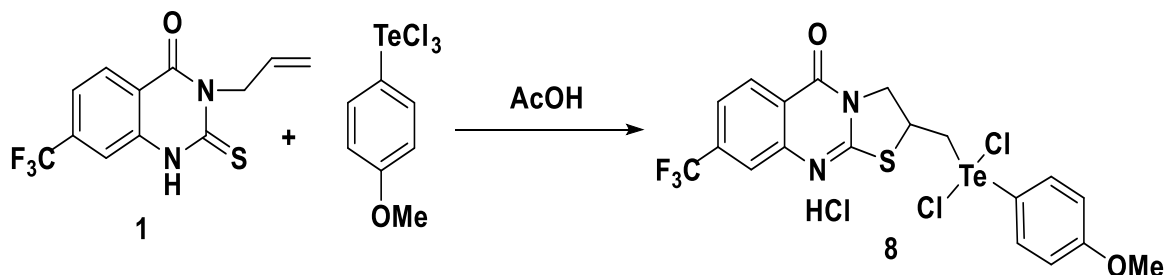
Використання тетрагалогенідів селену та телуру в реакції електрофільної циклізації з CF_3 -заміщеним тіоксохіназолоном **1** дозволить отримувати потенційно біологічно активні халькогенфункціоналізовані конденсовані хіназоліни. Такі електрофільні реагенти в реакціях з алкенільними ациклічними та гетероциклічними сполуками можуть утворювати як продукти приєднання, так і циклізації. Тетрагалогеніди халькогенів отримували *in situ* взаємодією діоксиду селену чи телуру з шестикратним надлишком відповідної галогеноводневої кислоти. Проведення реакції тетрагалогенідів селену з 3-аліл-2-тіоксо-6-трифторометилхіназолін-4-оном **1** в середовищі льодяної оцтової кислоти приводило до осмолення реакційної суміші та екструзії селену. Натомість реакція в середовищі хлороформу відбувається регіоселективно і приводить до утворення гідрогалогенідів 2-[(тригалогеноселено)метил]-8-(трифторо)-2,3-дигідро-5H-[1,3]тіазоло[2,3-b]хіназолін-5-онів **4, 5** лінійної будови. Про утворення гідрогалогенідів з анельованим тіазольним циклом свідчать спектри ЯМР ^1H , ^{13}C , ІЧ-спектри та елементний аналіз.



При використанні тетрагалогенідів телуру в реакції з 3-аліл-2-тіоксо-7-трифторометил-2,3-дигідрохіназолін-4(1H)-оном **1** в оцтовій кислоті відбувається циклізація з утворенням стійких телуртрихлоротіазолінохіназолінів **6,7**. Спектральні дані добре корелюють з селеновмісними аналогами **4,5**.



Для вивчення впливу арильного замісника в халькогеновмісному електрофілі на проходження електрофільної гетероциклізації використано *n*-метоксифенілтелуртрихлорид. Реакція хіназоліну **1** та *n*-метоксифенілтелуртрихлориду в льодяній оцтовій кислоті відбувається регіоселективно з утворенням тіазолохіназоліну лінійної будови з екзоциклічним атомом телуру — 2-{[дихлоро(4-метоксифеніл)-телуру]метил}-8-(трифторометил)-2,3-дигідро-5*H*-[1,3]тіазоло[2,3-*b*]хіназолін-5-ону **8**.



Таким чином, досліджено регіохімію електрофільної циклізації 3-аліл-2-тіоксо-6-трифторометил-2,3-дигідрохіназолін-4(1*H*)-оном під дією різних галогеновмісних електрофільних реагентів та отримано потенційно біологічно активні халькогеновмісні тіазолохіназоліни лінійної будови. Визначено, що природа електрофілу та наявність трифторометильного замісника не впливає на регіохімію процесу.

КВАНТОВО-ХІМІЧНЕ ДОСЛІДЖЕННЯ КОЛИВАЛЬНИХ СПЕКТРІВ ДЕЯКИХ СТРУКТУРНИХ ФРАГМЕНТІВ МАКРОМОЛЕКУЛ ЛІГНІНУ

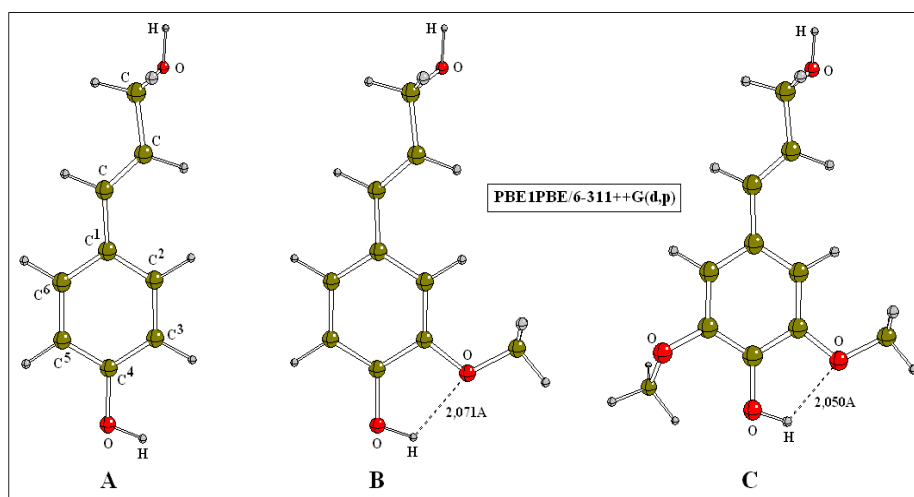
Токар А.В., Салигіна Т.П.

Дніпровський державний аграрно-економічний університет

вул. Сергія Єфремова, 25, 49009, м. Дніпро

atokar_2004@ukr.net

Вивчення структури макромолекул лігніну методами ІЧ-спектроскопії становить значну зацікавленість, перш за все, з точки зору пошуку сполук-попередників, що можуть слугувати за основу для побудови цього нерегулярного біополімеру. У межах даного дослідження як найпростіші модельні структури нами було обрано заміщені *транс*-коричні спирти: кумаровий (А), коніферилловий (В) та синаповий (С), для яких з використанням методу неемпірично узагальненого градієнтного наближення **PBE1PBE/6-311++G(d,p)** було локалізовано рівноважні геометрії молекул (рис. 1). Такий вибір є цілком виправданим, з одного боку, можливістю адекватного відображення найбільш суттєвих внутрішньо- та міжмолекулярних взаємодій, а з іншого – зручністю та простотою обчислювальних моделей, що є необхідною умовою для їх успішної реалізації.



8. Рис. 1. Структури модельних сполук (А–С) із деякими геометричними параметрами молекул

XXI Всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань сучасної хімії, Дніпро, 22-25 травня 2023 р.

Як відомо, розраховані методами квантової хімії гармонічні коливальні частоти зазвичай виявляються значно більшими порівняно з аналогічними параметрами, отриманими експериментальним шляхом. При цьому основним джерелом помилок є нехтування ефектами ангармонічності, а також відсутність повноти опису електронних кореляцій у зв'язку з використанням обмежених наборів базисних функцій.

Для підвищення точності розрахункових даних у їх відтворенні основних спектральних характеристик досліджуваних систем, зокрема хвильових чисел та інтенсивності окремих смуг поглинання, частіше за все застосовують додаткові множники, які у випадку неемпірично узагальненого градієнтного наближення становлять 0,9875, 0,9904 та 0,9944 для базисних наборів 6-31G(d), 6-31+G(d,p) та 6-311+G(d,p). Отримані результати представлено у табл. 1.

Таблиця 1. – Деякі гармонічні коливальні частоти (cm^{-1}), розраховані для модельних сполук (A–C) у наближенні PBE1PBE/6-311++G(d,p)

Інтенсивність	Теоретична модель			Інтерпретація
	A	B	C	
дуж. с.	3879	3878	3877	$\nu_{(\text{OH})}$ спиртових груп
	3871	3801	3793	$\nu_{(\text{OH})}$ фенольних груп
сер.	–	3084 3016	3087 3017	$\nu_{(\text{CH}_3)}$ метоксильних груп
сл.	3016 2971	3015 2970	3016 2970	$\nu_{(\text{CH}_2)}$ гідроксиметильних груп
сл.	1729	1728	1729	$\nu_{(\text{CC})}$ олефінових фрагментів
сер.	1674 1552	1671 1559	1661 1555	$\nu_{(\text{CC})}$ арильних фрагментів
сл.	–	1499 1461	1497 1453	$\delta_{(\text{CH}_3)}$ метоксильних груп
сл.	1384	1329	1363	$\delta_{(\text{CC})}$ за участю $\delta_{(\text{CH})}$ арильних фрагментів
дуж. с.	–	1064	1064	$\nu_{(\text{CO})}$ метоксильних груп

Умовні позначення: с. – сильна, сер. – середньої інтенсивності, сл. – слабка, дуж. – дуже; ν – валентні коливання, δ – деформаційні коливання.

Порівняльний аналіз одержаних результатів із наявними експериментальними даними свідчить про те, що найбільш інтенсивними є смуги поглинання в областях 3417-3438 та 1041-1052 cm^{-1} , причому в першому випадку мають справу з валентними коливаннями просторово ускладнених гідроксильних груп спиртового й особливо

фенольного типу, що утворюють міцні водневі зв'язки між окремими структурними фрагментами макромолекул. У другому випадку суттєвий внесок становлять інтенсивні валентні коливання етерного зв'язку метоксильних груп із переважанням ефектів внутрішньомолекулярного водневого зв'язування, що виникає на відстанях 2,050-2,070 Å (рис. 1).

Окремо ідентифіковано також типові валентні коливання бензенових кілець при 1625 та 1510 см^{-1} . Що стосується спектральної області 1731-1755 см^{-1} , то тут спостерігається лише одна не дуже інтенсивна смуга, яка відповідає валентним коливанням подвійних карбон-карбонових зв'язків. Деяких цікавих результатів вдалося досягнути при дослідженні молекулярної системи, побудованої на основі пінорезинолу (рис. 2), переважно за рахунок присутності жорсткого біциклічного фрагменту.

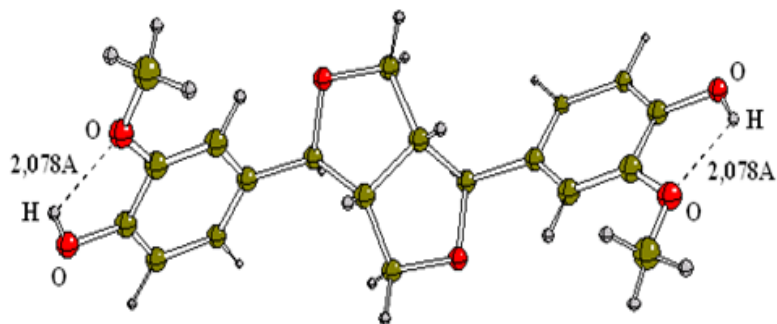


Рис. 2. Структура пінорезинолу

Найбільш характерні смуги поглинання у цьому випадку відповідатимуть метиленовим групам, що знаходяться у безпосередній близькості по відношенню атомів Оксигену каркасного фрагменту із валентними коливаннями в області 2846-2863 та 1038-1070 см^{-1} . Запропоновані теоретичні моделі в цілому адекватно відображають базові спектральні характеристики лігніну, одержані експериментальним шляхом.

Секція
ХІМІЯ ТА ХІМІЧНА
ТЕХНОЛОГІЯ
ВИСОКОМОЛЕКУЛЯРНИХ
СПОЛУК

Керівник: доц., канд. хім. наук Варлан
Костянтин Єлисейович

Секретар: доц., канд. хім. наук Косіцина Олена
Сергіївна

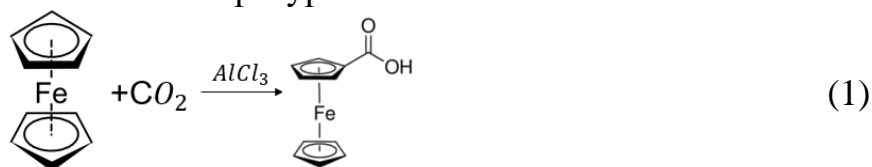
МОДЕЛЮВАННЯ ХІМІКО-ТЕХНОЛОГІЧНОГО ПРОЦЕСУ ВИРОБНИЦТВА ФЕРОЦЕНКАРБОНОВОЇ КИСЛОТИ

Нестеров А. М., Поджарський М. А.

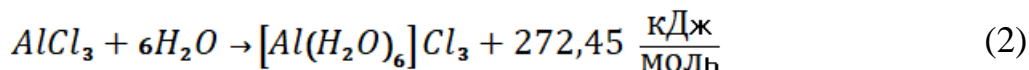
Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара

49010, м. Дніпро, просп. Гагаріна, 72

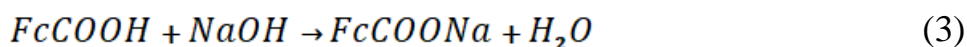
Фероцен та його похідні покращують енергетичні характеристики твердого ракетного палива. У даній роботі представлено створену з використанням програмного забезпечення ChemCAD комп'ютерну модель промислового виробництва фероценкарбонОВОЇ кислоти (ФКК), засновану на лабораторній методиці її синтезу з фероцену та вуглекислого газу [1]. Процес синтезу починається з приготування розчину фероцену і хлориду алюмінію у бензолі. Розчин нагрівають до 40°C. Через розчин барботують CO₂, реакція (1) протікає за температури 50°C.



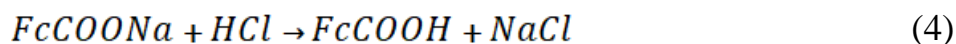
Після закінчення реакції реакційну масу охолоджують до 6°C. Після цього до неї додають холодний 12% водний розчин SnCl₂ для розкладання алюміній хлориду за реакцією (2):



Отриману суспензію фільтрують від осаду. Розділяють суміш бензол-вода. Осад розчиняють у 20% водному розчині NaOH за реакцією (3) і відфільтровують від осаду нерозчинного фероцену.



Для осадження фероценкарбонОВОЇ кислоти лужний фільтрат підкислюють додаванням 0,1 М розчину HCl. Протікає реакція (4). Осад, що утворився, відфільтровують, промивають чистою водою і висушують на повітрі. В результаті проведених нами експериментів встановлено, що з 16 г фероцену утворюється 10,28 г фероценкарбонОВОЇ кислоти. Вихід становить 52%.



Технологічна схема виробництва фероценкарбонОВОЇ кислоти змодельована в програмі ChemCAD на основі [2] рис 1.

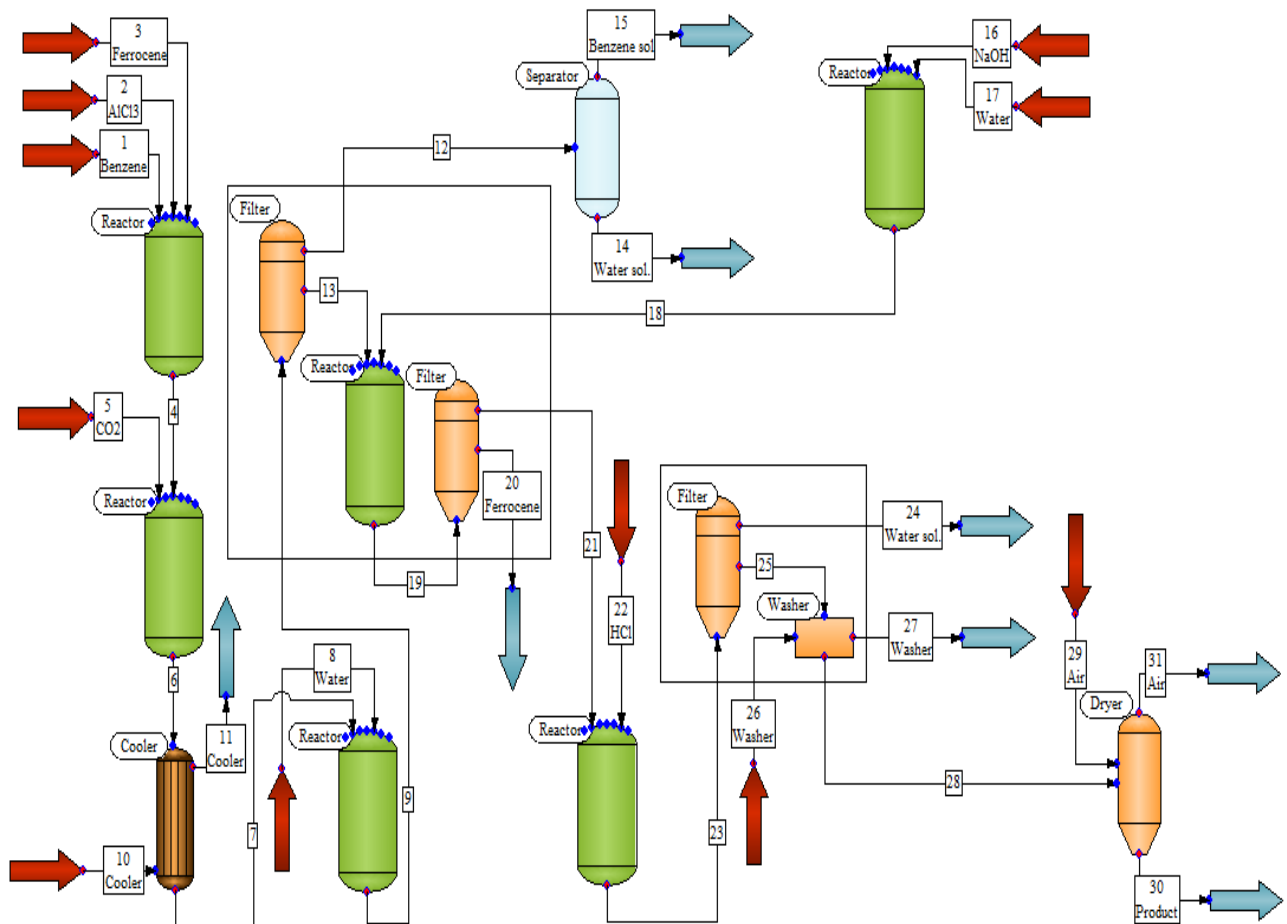


Рисунок 1 – Модель хіміко-технологічного процесу виробництва фероценкарбонової кислоти. Фероцен, $AlCl_3$ та бензол подаються за потоками 3, 2 та 1 відповідно в реактор, в якому моделюється перемішування з нагріванням у ізотермічному режимі. Отриманий розчин за потоком 4 надходить у реактор синтезу, у який також подається CO_2 та реакція моделюється як ізотермічний процес.

Перенос реакційної маси з реактора у теплообмінник, де охолоджується, показаний потоком 6. Подача та відвід холодного теплоносія теплообмінника показаний потоками 10 та 11 відповідно. Перенесення суміші з теплообмінника до реактора розкладання каталізатора показано потоком 7, в реактор надходить вода для реакції з $AlCl_3$. В реакторі змодельована ізотермічний процес проведення реакції (2).

Фільтр для фільтрування та лужного промивання осаду змодельовано з використанням 3 модулів: 2 Centrifugal filtration та 1 Stoichiometric reactor. Перший модуль моделює первинне фільтрування двофазної рідини

від осаду, другий модуль моделює протікання реакції (3) для утворення розчинної форми кислоти, 3-ій модуль моделює фільтрування лужного розчину кислоти від залишків фероцену. Розчин луку готується у моделі реактора з потоків 16 та 17. Двофазна суміш надходить на розділення за потоком 12. Фільтрований лужний розчин фероценкарбонової кислоти виходить з комплексу модулів за потоком 21 на підкислення у реакторі.

У моделі реактора, до якого надходять потоки 21 та 22, моделюється реакція (4). За потоком 23 розчин надходить на комплекс модулів, що моделюють нутч-фільтр.

У першому модулі Centrifugal filtration моделюється фільтрування кислотного розчину від осаду фероценкарбонової кислоти, у другому модулі Solids washer моделюється промивання осаду чистою водою. Вологий порошок надходить у сушарку за потоком 28. Порошок висушується контактним методом та покидає виробництво за потоком 30 та надходить на склад.

Моделювання окремих процесів у програмі ChemCAD виконується з використання вікна відповідного модуля. Для моделювання кожного процесу у хіміко-технологічному процесі виробництва ФКК використаний підходящий модуль та виконані налаштування.

Модель виробництва дозволяє отримати вихід продукту 52%, що співпадає з лабораторними дослідженнями. Отримана модель дозволяє аналізувати витрати речовин та енергії, підібрати оптимальний режим роботи технологічної схеми, удосконалити методику синтезу та проектувати реальні виробництва.

Перелік посилань

1. Ferrocenecarboxylic acid and microwave-assisted synthesis of ferrocenoyl hydrazones / [V. N. Kulikov, R. S. Nikulin, D. E. Arkhipov etc.]. // Russian Chemical Bulletin. – 2017. – P. 537–544.
2. ChemCAD version 7. User guide – Houston, Texas: Chemstations Inc, 2016. – 154 p.

**АНАЛІЗ АДГЕЗІЙНОЇ ПОВЕДІНКИ
ПОЛІВІНІЛПІРОЛІДОНОВИХ КОМПОЗИЦІЙ**
Земке В.М., Чопик Н.В., Братичак М., Пирожок А.А.
Національний університет „Львівська політехніка”
Україна, 79013, м. Львів, вул. С. Бандери, 12
viktoriiia.m.zemke@lpnu.ua

В основі вивчення та аналізу адгезійних явищ лежить термодинамічний підхід, який передбачає регулювання двох питань: формування адгезійного контакту та взаємодія контактуючих поверхонь. Ці завдання тісно пов'язані з аналізом міжфазних процесів та найбільшу увагу приділяють оцінюванню явищ змочування і розтікання. Кількісною характеристикою контактного змочування є крайовий кут θ , а необхідною умовою - змочування поверхні підкладки.

На сучасному етапі розвитку технологій вирішальне значення мають полімери, які володіють високою поверхневою активністю, здатністю до комплексоутворення, сорбційними властивостями та доброю розчинністю у воді. До таких полімерів належить полівінілпіролідон (ПВП) та його кополімери. В роботі проведені дослідження впливу концентрації та природи низькомолекулярних доданків на адгезійні властивості композицій ПВП з 2-гідроксіетилметакрилатом (ГЕМА). Для цього на основі ГЕМА в присутності пероксидбензоїлу готували композиції ПВП із його вмістом 0.5, 1, 1.5 та 2 %. В якості низькомолекулярних доданків використовували: ортофосфатну кислоту та ізопропіловий спирт у концентраціях 0.3, 0.5 та 1% [3]. Дослідження проводили на підкладках різної природи: «скло органічне», «скло силікатне», «кераміка з глянцевою поверхнею», «кераміка з необробленою поверхнею», «стальна пластина», «кісткова тканина». Дослідження показали, що найбільшої зміни від введення додатків зазнали композиції на підкладці «стальна пластина». Найкраще проявили себе розчини на підкладці «кісткова тканина», маючи при цьому дещо менший кут змочування, а значить доброю адгезивною здатністю. Введення ортофосфатної кислоти та ізопропілового спирту в систему призвело до абсолютно дзеркальних змін характеру кривих для підкладок «стальна пластина», «кераміка з необробленою поверхнею», що пояснюється різною природою додатків [3].

Через значення кута змочування можна розрахувати роботу адгезії. Роботу адгезійного зв'язку можна визначити з рівняння Дюпре [2]. На практиці використовують комбіноване рівняння Дюпре-Юнга, що дозволяє непрямий розрахунок роботи адгезії через поверхневий натяг рідини та рівноважний крайовий кут змочування рідиною твердого тіла:

$$\frac{W_a}{W_k} = \frac{(1 + \cos \theta)}{2}$$

де W_a – робота адгезій, W_k - робота когезії, θ - крайовий кут.

В таблиці 1 наведені розраховані дані для водних розчинів ПВП з додаванням низькомолекулярного доданку, на прикладі H_3PO_4 , для всіх видів підкладок.

Таблиця 1

Відношення розрахованої роботи адгезії до роботи когезії (W_a / W_k)

Матеріал (підкладка)	W_a / W_k															
	ПВП 0.5%				ПВП 1%				ПВП 1.5%				ПВП 2%			
	чист	H_3PO_4 , %			чист	H_3PO_4 , %			чист	H_3PO_4 , %			чист	H_3PO_4 , %		
0.3		0.5	1	0.3		0.5	1	0.3		0.5	1	0.3		0.5	1	
стальна пластина	0.92	0.92	0.99	0.99	0.91	0.98	0.97	0.99	0.98	0.96	0.98	0.99	0.92	0.94	0.96	0.96
кераміка з глянц. поверх.	1.00	-	0.99	0.99	0.99	1.00	1.00	-	1.00	0.99	1.00	1.00	1.00	1.00	0.97	1.00
кераміка з необр. поверх.	0.97	0.95	0.98	0.96	0.98	0.98	0.98	0.98	0.98	0.98	0.98	0.98	0.98	0.98	0.98	0.97
скло органічне	-	1.00	1.00	0.99	-	1.00	-	-	0.99	1.00	1.00	1.00	1.00	0.99	1.00	1.00
скло силікатне	1.00	1.00	1.00	0.99	-	1.00	-	-	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00
кісткова тканина	0.96	0.94	0.95	0.95	0.96	0.95	0.97	0.94	0.94	0.96	0.95	0.97	0.94	0.95	0.94	0.96

Як бачимо, введення низькомолекулярного додатку із збільшенням його концентрації призводила до зростання співвідношення W_a/W_k . Підкладки «скло органічне», «скло силікатне» та «кераміка з глянцевою поверхнею» проявили себе з максимальною адгезією водним розчином ПВП. Аналогічні дослідження проведені з ізопропіловим спиртом та встановили, що із підвищенням концентрації низькомолекулярного додатку та ПВП у розчині адгезійна здатність зростає, крім підкладок «кераміка з необробленою поверхнею» та «кісткова тканина» [3]. Розрахунок роботи адгезійної здатності для композиції з ГЕМА наведені в таблиці 2.

Таблиця 2

Відношення розрахованої роботи адгезії до роботи когезії для композицій ПВП з ГЕМА

Матеріал (підкладка)	W_a / W_k			
	ПВП 0.5%	ПВП 1%	ПВП 1.5%	ПВП 2%
стальна пластина	0.99	0.98	0.99	0.98
кераміка з глянц. поверхнею	1.00	0.97	1.00	0.99
кераміка з необр. поверхнею	0.99	0.99	1.00	0.99
скло органічне	0.98	1.00	1.00	1.00
скло силікатне	0.99	1.00	0.99	0.99
кісткова тканина	0.99	1.00	0.99	1.00

Отже, максимальне значення адгезійної міцності, як і передбачалось, властиве при використанні органічного скла, хоча у випадку природної кістки адгезійна міцність досить висока. Зростання вмісту ПВП у ГЕМА призводить до покращення адгезійної здатності для всіх доданків.

Введення низькомолекулярних додатків, як і в попередніх дослідженнях, відношення роботи адгезії до роботи когезії наведені в таблиці 3.

Таблиця 3

Відношення розрахованої роботи адгезії до роботи когезії

Матеріал (підкладка)	W_a / W_k			
	ПВП 1%			
	0.3% H_3PO_4	1% H_3PO_4	0.3% ізопр. спирт	1% ізопр. спирт
сталена пластина	0.97	0.99	1.00	0.97
кераміка з глянц. поверхнею	0.99	0.99	1.00	0.99
кераміка з необроб. поверхнею	1.00	0.99	0.99	0.99
скло органічне	0.99	1.00	0.99	0.99
скло силікатне	0.99	0.99	1.00	0.99
кісткова тканина	1.00	1.00	1.00	1.00

З результатів, зведених в таблиці 3 видно, що природа додатку покращала адгезивну здатність композицій.

Вивчення впливу низькомолекулярних доданків з різною поверхневою активністю на структуру та адгезивну активність полімерних матриць дасть можливість їх контрольованого регулювання, що є необхідною умовою при розробленні водорозчинних клеїв біомедичного призначення.

Отже, на основі значень кута змочування на підкладках різної природи встановлено, що для композицій полівінілпіролідону з 2-гідроксіетилметакрилатом введення низькомолекулярного додатку покращує адгезійну здатність.

Перелік посилань

1. Баран Н.М., Земке В.М., Чопик Н.В. Дослідження адгезійних властивостей композицій полівінілпіролідону // XII Всеукр. конф. молодих вчених та студентів з актуальних питань сучасної хімії. – Тези доп. – 2014. – Дніпропетровськ. – С.60.

2. О.В. Суберляк, П.І. Баштанник. Технологія переробки полімерних та композиційних матеріалів. – Львів: Вид-во «Растр-7», 2007. – 376 с.

3. Bratychak M., Chopyk N., Zemke V. Effect of hydroxyapatite on the glue seam strength of the compositions which contain polyvinylpyrrolidone // Chemistry & Chemical Technology. – 2016. – Vol. 8, № 4. – P.411-417.

ЕНЕРГЕТИЧНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ МАТЕРІАЛІВ НА ОСНОВІ ВИСОКОМОЛЕКУЛЯРНИХ СПОЛУК

Лебідь А.І., Косіцина О.С.

*Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара
49010, м. Дніпро, пр. Гагаріна, 72*

Основою переважної більшості відомих енергонасичених композицій є полімерна матриця, в якій розподілені енергетичні матеріали (ЕМ). Якщо в якості енергетичного матеріалу використовують вибухові речовини (ВР), отримують пластичні вибухові композиції (ПВК). Серед галузей використання вибухових композицій виділяють загартовування металевих листів, вибухове зварювання або різання; підводні вибухові роботи; вибуховий динамічний захист (ЕРА); знесення споруд вибуховим методом тощо. Актуальним є пошук вибухових композицій високої потужності та низької чутливості. На даний момент досягнута продуктивність вибухових композицій на основі традиційних енергетичних матеріалів на рівні 7400 м/с. Тривають пошуки полімерних систем, що підтримуватимуть високий рівень продуктивності, механічних властивостей та знижену чутливість до зовнішніх імпульсів.

Енергонасиченими матеріалами, що використовуються в складі ПВК, є гексоген (RDX), октоген (HMX), тетранітрат пентаерітролу (PETN), 2,4,6,8,10,12-гексанітро-2,4,6,8,10,12-гексаазоізовюрцитан (CL-20), 3-нітро-1,2,4-триазол-5-он (NTO), 1,3,5-триаміно-2,4,6-тринітробензен (TATB), 1,1-діаміно-2,2-динітроетилен (FOX-7) [1,2]. Серед полімерів, що входять до складу ПВК, найчастіше використовують низькомолекулярні полібутадієни з кінцевими функціональними групами: полібутадієн з кінцевими гідроксильними групами (НТРВ), полібутадієн з кінцевими карбоксильними групами (СТРВ). НТРВ є надзвичайно популярним компонентом енергонасичених композицій завдяки простоті реакції його тверднення з формуванням міцних зв'язків, а також завдяки його здатності вміщувати велику кількість твердих компонентів. Досліджена та описана велика кількість вибухових композицій на основі НТРВ. Наприклад, встановлено, що композиція на основі CL-20 та НТРВ зі співвідношенням 91 : 9, відповідно, має швидкість детонації на рівні 8850 м/с [1-3].

Перспективними для використання в складі ПВК є термопластичні еластомери (ТПЕ). ТПЕ – це зшиті полімерні системи з високою здатністю до деформацій в області низьких температур (подібно до еластомерів) та здатністю підлягати обробці при високих температурах (подібно до термопластів). Цей клас полімерів забезпечує високу когезійну міцність до досягнення помірно високої температури. ТПЕ фактично є співполімерами

типу АВА або АВ, де А – жорсткий, а В – м'який сегменти. ТПЕ поділяють на чотири категорії: блок-співполімери на основі стирену та бутадієну (ізопрену); поліуретани, поліестери, поліолефіни. Поліолефіни, що відносяться до ТПЕ, є системами, одержаними змішуванням кристалічного поліолефіну (поліпропілену) з еластомерами на основі етилен-пропілену. Поліолефінові ТПЕ, в залежності від структури полімеру, можуть бути жорсткими або гнучкими матеріалами. ТПЕ цього класу зберігають еластичні властивості в діапазоні температур від – 60 до – 100 °С. Прикладом полімерів цього класу є співполімер етилену та вінілацетату – етиленвінілацетат (EVA). Вміст вінілацетату визначає механічні властивості співполімеру та його тип. Найчастіше використовують EVA з 10 – 50 % вмістом вінілацетату. Діапазон робочих температур EVA від + 55 до – 80 °С [1]. Серед найбільш поширених вибухових композицій – композиції на основі RDX [1-3]. Динаміка запитів користувачів в пошуковій системі Google Trends за ключовим словом «RDX» наведена на рисунку 1.

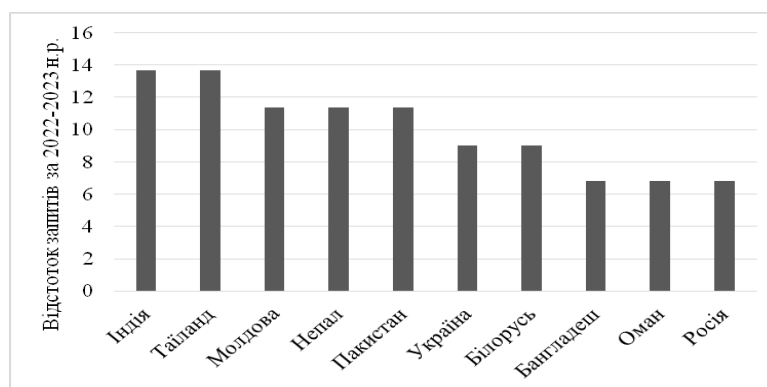


Рисунок 1 – Середня кількість запитів в пошуковій системі Google Trends за темою «RDX» в світі за 2022-2023 рік

Дослідження композиції на основі RDX та НТРВ показало, що на відміну від композицій RDX з іншими полімерами, композиція RDX-НТРВ має підвищену нечутливість до удару та нагрівання. Введення до композиції RDX-НТРВ добавки ТАТВ в кількості від 10 до 20 % (за рахунок зменшення кількості RDX) приводить до зниження швидкості детонації з 7300 м/с до 7100 м/с та зниження чутливості до удару на 30 %. Для композиції RDX-NTO-Estane (термопластичного поліуретану) введення 5-25 % NTO приводить до підвищення швидкості детонації з 6590 м/с до 6900 м/с та зниження чутливості до удару на 23 % [1].

Нами на основі стандартних методик [4,5] були визначені енергетичні характеристики для вибухових композицій на основі RDX та різних типів полімерів – EVA, Estane, НТРВ. Досліджено вплив добавок

вибухових речовин типу NTO та ТАТВ на теплоту вибуху даних композицій (рис.2).

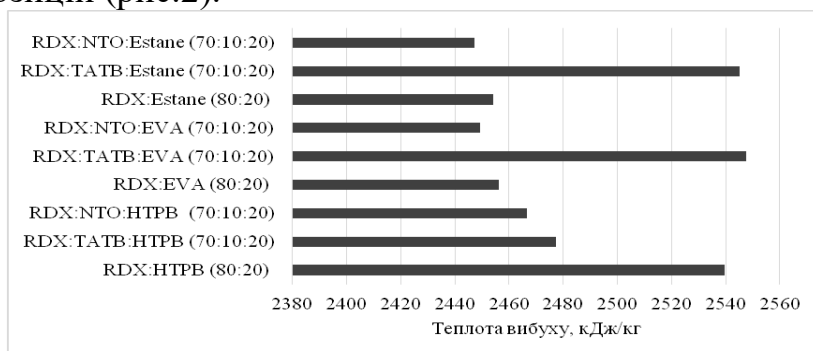


Рисунок 2 – Теплота вибуху композицій на основі RDX

Знайдено, що введення до складу композиції RDX-HTPB 10 % добавок ТАТВ та NTO приводить до зменшення теплоти вибуху на 2,46 % та 2,87 % відповідно. Введення добавки ТАТВ до композиції RDX-EVA та RDX-Estane приводить до збільшення теплоти вибуху на 3,7 %, а введення добавки NTO до цих композицій практично не впливає на теплоту вибуху. Серед розглянутих композицій найбільший вплив на величину теплоти вибуху для композицій на основі EVA та Estane має ТАТВ. Теплота вибуху для композиції на основі RDX та HTPB без добавок наближається до значень інших композицій з додаванням ТАТВ. Одержані результати потребують подальших досліджень для визначення оптимального співвідношення компонентів та складу композицій.

Література:

[1] Talawar M.B. New directions in the science and technology of advanced sheet explosive formulations and key energetic materials used in the processing of sheet explosives: Emerging trends / M.B. Talawar, S.K. Jangid, T. Nath, R.K. Sinha, S.N. Astana // Journal of Hazardous Materials. – 2015. – Vol. 300. – P. 307-321.

[2] Talawar M.B. Environmentally compatible next generation green energetic materials (GEMs) / M.B. Talawar, R. Sivabalan, T. Mukundan, A.K. Sikder, B.R. Gandhe, A. Subhananda Rao // Journal of Hazardous Materials. – 2009. – Vol. 161. – P. 589-607.

[3] Frem D. A Reliable Method for Predicting the Specific Impulse of Chemical Propellants // Journal of Aerospace Technology and Management. – 2018. – e3318.

[4] Горбонос М. Г. Методические указания по практическим занятиям и задания для самостоятельной работы по дисциплине «Технология и безопасность взрывных работ» для студентов специальности 130403 «Открытые горные работы». Часть 1. – Петрозаводск, Петрозаводский государственный университет. – 2011. – 51 с.

[5] Сугак Н.Ю. Расчет взрывчатых характеристик ВВ: учебное пособие / Н.Ю. Сугак, С.В. Мочалов; Алт.гос.техн.ун-т, БТИ. – Бийск: Изд-во Алт.гос.техн.ун-та, 2013. – 106 с.

ПЕРЕВІРКА МОЖЛИВОСТЕЙ КЛАСИЧНОЇ ТЕХНОЛОГІЇ ХІМІЧНОЇ МЕТАЛІЗАЦІЇ ГРАНУЛ ПОЛІМЕРІВ

Кучеренко. А.М.¹, Моравський В.С.¹, Дулебова Л.²

¹*Національний університет «Львівська політехніка»,
вул. Степана Бандери, 12, 79013, м. Львів*

²*Technical University of Košice, Letná 9, 042 00, Košice*

Сучасний розвиток науки й техніки вимагає використання нових матеріалів до яких ставляться підвищені вимоги стосовно їх фізико-механічних властивостей, а також можливості надання таким матеріалам нових нехарактерних властивостей.

Типові полімерні матеріали володіють порівняно невисокими фізико-механічними властивостями, що вимагає розроблення методів з підвищення їх міцності. [1]. Введення наповнювачів, що можуть взаємодіяти з полімерною матрицею, призводить до покращення механічних, а також, теплофізичних показників композицій. Полімерні композитні матеріали вдосконалюють шляхом включення наночастинок металу для покращення їх композитної структури. Крім того, введення в полімерні матеріали металів можуть надати їм нових функціональних властивостей, наприклад підвищити теплопровідність і електропровідність. [2].

Металополімерні композити, що поєднують високу міцність і низьку густину полімерної матриці з високопластичними властивостями металів, набули популярності протягом останніх кількох десятиліть. [3]. Їх використовують для проектування конструкцій в аерокосмічній, автомобільній, електронній та спортивній промисловості. [4]. Полімери частково замінили метали у згаданих сферах через їх низьку масу, антикорозійні властивості, здатність до екранування електро-магнітних випромінювань [5], низьку вартість та порівняно просту технологію переробки. [4]. Також нанокompозити полімер-метал мають широке застосування в біомедичних областях, каталізі і доставці ліків. [6]. Металонаповнені полімерні композити володіють підвищеною електричною провідністю. Провідність полімерних композитів, які містять дисперсні електропровідні наповнювачі, залежить від багатьох факторів, таких як розмір і форма частинок наповнювача, їх просторовий розподіл у полімерній матриці, взаємодія між поверхнею наповнювача та полімерною матрицею та контактний опір між суміжні частинки. [7].

Існує багато методів поєднання полімеру з металом. Одним з таких методів є металізація, яка включає фізичне осадження металу з парової фази, електрохімічне напилення, різні методи термічного розпилення, ряд методів прямого напилення, а також методи склеювання (адгезивне склеювання, методи з'єднання оплавленням, включаючи ультразвукове з'єднання, з'єднання тертям, за допомогою електромагнітної індукції та лазерне з'єднання). Металева функціональна оболонка на полімері може покращити електричні, термічні та механічні властивості, а також хімічну та фотохімічну зносостійкість полімерної поверхні, тим самим підвищуючи міцність і стабільність полімерних виробів. [4].

Нами досліджується можливість створення металонаповнених композитів в результаті переробки металізованої полімерної сировини. В даній технології введення металу в полімерну матрицю відбувається на стадії переробки і одержання виробу. З метою одержання металізованої полімерної сировини нами було проведено серію досліджень, що включала перевірку можливостей класичної технології металізації. Класична схема металізації полімерів є багатостадійною і включає стадії: обезжирення, травлення, сенсibiliзацію, активування та осадження металу на поверхню полімеру. В дослідженнях ми використовували високотонажні гранульовані полімери: поліетилен (ПЕ), поліпропілен (ПП), та жорсткий полівінілхлорид (ПВХ).

Використання класичної технології виявилось неефективним. Отримати мідне покриття вдалося лише для гранул жорсткого ПВХ, при використанні CCl_4 , як травильного агента. На гранулах ПЕ та ПП мідне покриття вдалося отримати не на всіх гранулах, при цьому покриття було не суцільним та не покривало повністю гранули.

При використанні хромової суміші, як травильного агента одержати мідне покриття на гранулах згаданих полімерів також не вдалося. На жодному із зразків не вдалося отримати суцільне мідне покриття, мідь осіла у вигляді розсипчастого шару металу.

При використанні в якості травильного агента киплячої концентрованої кислоти певні позитивні результати вдалося отримати лише для гранул ПВХ, однак і в цьому випадку мідний шар представляв собою рихлий шар який легко відділявся від поверхні. Для гранул ПЕ та ПП суцільне мідне покриття отримати не вдалося.

XXI Всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань сучасної хімії, Дніпро, 22-25 травня 2023 р.

Для оцінки ефективності травильного агенту на зміну структури поверхневих шарів було проведено дослідження з встановлення зміни крайового кута змочування поверхні полімеру (таблиця).

Таблиця

Значення крайового кута змочування полімерної поверхні

№	Травильний агент	Полімер		
		Жорсткий ПВХ	ПЕ	ПП
1	–	84,4	90,8	81,7
2	CCl ₄	68,5	89,3	86,9
3	Хромова суміш	71,1	82,8	77,4
4	HNO ₃	72,2	89,1	75,0

Одержані результати дозволяють стверджувати, що використані травильні агенти мають невисоку ефективність. Гідрофільність полімерної поверхні полімерів залишається низькою.

Таким чином, на основі проведених досліджень, можна зробити висновок, що саме поєднанням складності зміни структури і гідрофобності поверхні використаних полімерів не вдалося одержати на полімерних гранулах мідний шар задовільної якості з використанням класичної технології металізації.

У випадку полівінілхлоридних гранул певні позитивні моменти в результатах металізації можна пояснити полярністю макромолекули полівінілхлориду і, як наслідок, можливо кращою адсорбцією каталітично активних іонів на стадії активації.

Також необхідно відмітити низьку ефективність використання класичної технології з метою металізації запропонованих типів полімерів. При цьому можна зауважити, що в процесі металізації відбувається повне відновлення іонів міді з розчину хімічного відновлення на що вказує знебарвлення розчину в кінці процесу металізації.

Таким чином, на основі одержаних результатів, встановлена низька ефективність і принципова непридатність класичної технології металізації для формування на гранулах поліетилену, поліпропілену і жорсткого полівінілхлориду мідного покриття і наступного одержання металовмісних композитів з використанням запропонованої технології. Крім того, класична технологія металізації відзначається багатостадійністю,

необхідністю використання дорогоцінних металів, легких і агресивних середовищ, а також вимагає багаторазового промивання та сушіння гранул полімеру.

Перелік посилань:

[1] Megavannan Mani, M. Thiyagu, Pradeep Kumar Krishnan, Review of the effects of low-velocity impact events on advanced fiber-reinforced polymer composite structures, *Materials Today: Proceedings*, 2023, <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2023.04.255>.

[2] M.D. Kiran, H.K. Govindaraju, B.R. Lokesh Yadhav, Nithin Kumar, Effect of various parameters on fracture toughness of polymer composites: A review, *Materials Today: Proceedings*, 2023, <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2023.03.129>.

[3] Deepak Kumar Pokkalla, Ahmed Arabi Hassen, David Nuttall, Nikolaos Tsiamis, Mitchell L. Rencheck, Vipin Kumar, Peeyush Nandwana, Chase B. Joslin, Patrick Blanchard, Sangram Laxman Tamhankar, Patrick Maloney, Vlastimil Kunc, Seokpum Kim, A novel additive manufacturing compression overmolding process for hybrid metal polymer composite structures, *Additive Manufacturing Letters*, V. 5, 2023, 100128, <https://doi.org/10.1016/j.addlet.2023.100128>.

[4] Ruslan Melentiev, Arief Yudhanto, Ran Tao, Todor Vuchkov, Gilles Lubineau, Metallization of polymers and composites: State-of-the-art approaches, *Materials & Design*, V. 221, 2022, 110958, <https://doi.org/10.1016/j.matdes.2022.110958>.

[5] Jiajin Li, Zhiqiang Liu, Ruizhi Zhang, Guoqiang Luo, Yi Sun, Jian Zhang, Qiang Shen, Surface treatment and solvent co-assisted easy direct bonding of polymer/metal, *Materials & Design*, V. 204, 2021, 109641, <https://doi.org/10.1016/j.matdes.2021.109641>.

[6] Jordan Robert, Deepak S. Chauhan, Amel Cherraj, Jonathan Buiel, Gregory De Crescenzo, Xavier Banquy, Coiled-coil peptide-based assembly of a plasmonic core-satellite polymer-metal nanocomposite as an efficient photothermal agent for drug delivery applications, *Journal of Colloid and Interface Science*, V. 641, 2023, 929-941, <https://doi.org/10.1016/j.jcis.2023.03.085>.

[7] Ye.P. Mamunya, H. Zois, L. Apekis, E.V. Lebedev, Influence of pressure on the electrical conductivity of metal powders used as fillers in polymer composites, *Powder Technology*, V. 140, 2004, 49-55, <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2003.11.010>.

ОСОБЛИВОСТІ ПЛАСТИФІКАЦІЇ КРОХМАЛЬМИСНИХ МАТЕРІАЛІВ

Кечур Д.І., Куліш Б.І., Масюк А.С., Левицький В.Є.

Національний університет «Львівська політехніка»

79013, м. Львів, вул. Бандери, 12

Сьогодні в галузі полімерних і композиційних матеріалів активно розвивається напрям біодеградабельних полімерів і композиційних матеріалів на їх основі. Використання біодеградабельних полімерів привернуло значну увагу в останні роки через занепокоєння щодо впливу пластикових відходів на навколишнє середовище. Ці матеріали пропонуються як альтернатива звичайним пластмасам у різноманітних сферах застосування, включаючи упаковку, сільське господарство, медичні матеріали та споживчі вироби одноразового використання.

Біодеградабельні полімери можуть розкладатися на природні сполуки під впливом певних умов, таких як тепло, сонячне випромінювання, волога або мікроорганізми. Ці матеріали отримують з відновлюваних ресурсів, таких як рослини та мікроорганізми. Існує кілька типів полімерів, які здатні до біодеградації, найпоширенішими є полілактид (ПЛА), та полімери на основі крохмалю, зокрема термопластичний крохмаль (ТПК). Пластифікація крохмалю — це процес, у якому крохмаль перетворюється з жорсткого та крихкого матеріалу на більш гнучкий та придатний для переробки. Пластифікація крохмалю покращує його технологічність і підвищує механічні властивості. Процес пластифікації може бути досягнутий різними методами, включаючи екструзію, пресування та лиття з розчину. Вибір пластифікатора та умов обробки може мати істотний вплив на властивості одержуваного крохмального матеріалу. Однією з проблем пластифікації крохмалю є досягнення балансу між технологічністю та механічними властивостями, збільшення вмісту пластифікатора може покращити технологічність, але може погіршити механічні властивості матеріалу. Тому оптимізація вмісту пластифікатора та умов обробки має вирішальне значення для досягнення бажаних властивостей крохмального матеріалу. У цей же час, найбільшого поширення з точки зору промислового використання набувають суміші ТПК з іншими біодеградабельними полімерами. Суміші ТПК з полілактидом привертають увагу як матеріали з покращеними експлуатаційними властивостями та регульованою здатністю

до біодеградації. Змішування ТПК з ПЛА може покращити механічні властивості, такі як міцність і ударна в'язкість отриманого матеріалу. Однак змішування ТПК з ПЛА відзначається рядом проблем: ТПК має відносно низьку температуру склування, що може обмежити термічну стабільність і механічні властивості суміші; низька сумісність призводить до поділу фаз і погіршення властивостей; міграція пластифікатора з ТПК в ПЛА може погіршувати його властивості. Додавання компатибілізатора, такого як епоксидована соєва олива (ЕСО), може покращити міжфазну адгезію між двома полімерами та підвищити їх технологічну сумісність.

У даній роботі для розроблення оптимального технологічного режиму пластифікування крохмалю і одержання на його основі біодеградабельних полілактидних матеріалів були проведені дослідження з встановлення впливу пластифікатора гліцерину і компатибілізатора епоксидованої соєвої оливи на фізико-хімічні властивості як нативного крохмалю так і пластифікованого. Для підтвердження фізико-хімічних взаємодій крохмалю з гліцерином та ЕСО були проведені віскозиметричні дослідження. Дослідження проводили за допомогою ротаційного віскозиметра "Rheomat-30" за швидкостей зсуву 5-30 сек⁻¹ з використанням системи коаксіальних циліндрів згідно ISO 3219. Для досліджень були використані два типи крохмалю: висушений крохмаль та вологонасичений промисловий.

Виявлено, що для гліцеринвмісних систем в'язкість є вищою, ніж для ЕСО вмісних, що, очевидно, пов'язано з процесом пластифікації крохмалю і переходом його у передтермопластичний стан. При цьому, на перших етапах процесу пластифікації відбувається незначне зростання в'язкості з наступним її падінням, що, очевидно, обумовлено проходженням процесів ретроградації крохмалю. У випадку використання ЕСО зміни в'язкості майже не відбуваються, що свідчить про низьку здатність епоксидованої соєвої оливи до пластифікації крохмалю, зокрема через гідрофобну природу молекул ЕСО. Очевидно, в даних системах частинки крохмалю диспергуються в середовищі ЕСО і може відбуватися часткова адсорбція ЕСО на поверхні крохмальних гранул. Відомо, що пластифікація крохмалю гліцерином може бути досягнута тільки при нагріванні суміші до температури, що перевищує температуру склування крохмалю. Під час цього процесу молекули гліцерину дифундують у крохмальну матрицю та розривають водневі зв'язки між молекулами крохмалю. У цей

же час, ступінь пластифікації крохмалю гліцерином залежить від ряду факторів, включаючи концентрацію гліцерину, температуру і час обробки. Нами, було досліджено вплив швидкості зсуву та часу витримки за температури на в'язкість сумішей крохмаль-гліцерин. Встановлено, що вологонасичений крохмаль і висушений ведуть себе дуже подібно в даній системі, зокрема найбільша в'язкість характерна для швидкостей зсуву в діапазоні 18-25 сек⁻¹. Слід відзначити також значне зростання в'язкості системи спостерігається із збільшенням часу витримки, що очевидно, викликано процесами пластифікації крохмалю і його набуханням в гліцерині.

Цікавим з технологічної точки зору було дослідити вплив додатку ЕСО на зміну в'язкісних характеристик системи крохмаль-гліцерин. Виявлено, що наявність в системі ЕСО призводить до суттєвого зменшення в'язкості системи при всіх швидкостях зсуву. При цьому, час витримки практично не впливає на в'язкість системи, що можна пояснити блокуванням молекулами ЕСО пластифікуючої дії гліцерину. Зміни характеристик розроблених матеріалів, очевидно, обумовлені наявністю фізико-хімічних та хімічних взаємодій між компонентами системи, насамперед між ЕСО, гліцерином та крохмалем.

Досліджено вплив сорбованої вологи (до 25% мас.) на закономірності модифікування крохмалю, оскільки сушіння крохмалю передбачає введення додаткової технологічної стадії під час виробництва полімерних композиційних матеріалів. Загалом, виявлено, що вологонасичений крохмаль, має менші значення в'язкості, порівняно з безводним. Це, на нашу думку, пов'язано з частковим процесом проходження пластифікації крохмалю молекулами води. Доцільність проведення досліджень з вологонасиченим крохмалем підтверджується даними кінетики сушіння крохмалю до постійної маси. Виявлено, що для висушування крохмалю необхідно мінімум 5 годин, що здорожчує технологію одержання і сам крохмальвмісний полілактидний матеріал. Встановлені фізико-хімічні закономірності модифікування сухого і вологонасиченого картопляного крохмалю пластифікаторами різної природи – гліцерином та епоксидованою соєюю оливою. На основі реологічних кривих виявлено вплив пластифікаторів на в'язкість систем гліцерин-крохмаль залежно від швидкості зсуву і часу витримки при температурі.

Секція
**ФІЗИЧНА ТА
НЕОРГАНІЧНА ХІМІЯ**

Керівник: доц., канд. хім. наук **Стець Надія
Вікторівна**

Секретар: доц., канд. хім. **Плясовська Катерина
Андріївна**

QAİM-АНАЛІЗ π -КОМПЛЕКСІВ $[\text{Cu}^+_2\text{Cl}_2(\pi\text{L})_2]$ З МАЛЕЇНОВОЮ КИСЛОТОЮ В ЯКОСТІ ЛІГАНДУ

Курасова Ю.Д., Осокін Є.С., Варгалюк В.Ф., Полонський В.А.
*Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара,
49010, г. Дніпро, пр-т Гагаріна, 72*

Антибактеріальні властивості ацидокомплексів міді привертають підвищений інтерес [1]. Аналогічно можуть себе поводити змішані хлоридні ацидоаквакомплекси купруму (I). Введення аніону хлору допомагає стабілізувати тверду фазу шляхом підвищення стійкості цих структур завдяки полідентатності хлору [2].

В попередній роботі досліджувалась геометрична та електронна будова π -ацидоаквахлорокомплексів Cu^+ з малеїною, фумаровою та акриловою кислотами в якості органічного ліганду загального вигляду $[\text{Cu}^+(\text{H}_2\text{O})_n(\text{Cl}^-)(\text{L}^z)]$, де n – кількість молекул води у внутрішній координаційній сфері, L – молекула карбонової кислоти [3].

В роботі проводилось моделювання кластерів загального складу $[\text{Cu}^+_2\text{Cl}_2(\pi\text{L})_2]$, де L – молекулярна (H_2M) та депротоновані форми (HM^- , M^{2-}) малеїнової кислоти. Для цих сполук був проведений QAİM-аналіз за методом Бейдера [4] а також розраховувались ефективні заряди центрального атома за допомогою методу натуральних орбіталей Вейнхольда. Розрахунки wfn-файлів та електронна енергія з корекційними поправками виконувалась в програмі Gaussian 09. Методика виконання оптимізації систем наведена в роботах [3, 5]. Розрахунки та інтерпретація поверхні електронної густини з відповідними критичними точками виконувалось в програмі AIM2000 та AIMALL.

Було показано, що енергія зв'язування $\text{Cu}-\text{Cl}$ зв'язку для досліджуваних кластерів не змінюється в залежності від ступеня дисоціації

малеїнової кислоти, і складає близько 94 кДж/моль. При цьому для аквакластерів $[\text{Cu}^+_2\text{Cl}_2]$, $[\text{Cu}^+_2\text{Cl}_2(\text{H}_2\text{O})_2]$, $[\text{Cu}^+_2\text{Cl}_2(\text{H}_2\text{O})_4]$, значення енергії зв'язку $\text{Cu}-\text{Cl}$ змінюється в більш широких діапазонах, від 77 до 97 кДж/моль. Це вочевидь пов'язано з різною будовою (Cu_2Cl_2) -фрагменту для аквакластерів $[\text{Cu}^+_2\text{Cl}_2(\text{H}_2\text{O})_n]$, та малеїнатних кластерів $[\text{Cu}^+_2\text{Cl}_2(\pi\text{L})_2]$. Показано, що головною відмінністю є наявність слабого $(\text{Cu}^+-\text{Cu}^+)$ -зв'язку у кластерах типу $[\text{Cu}^+_2\text{Cl}_2(\text{H}_2\text{O})_n]$ та безводних кластерах $[\text{Cu}^+_2\text{Cl}_2]$ (рис. 1). На відміну від $[\text{Cu}^+_2\text{Cl}_2(\pi\text{L})_2]$ у (Cu_2Cl_2) -фрагменті якого відсутній Cu^+-Cu^+ зв'язку (рис. 2).

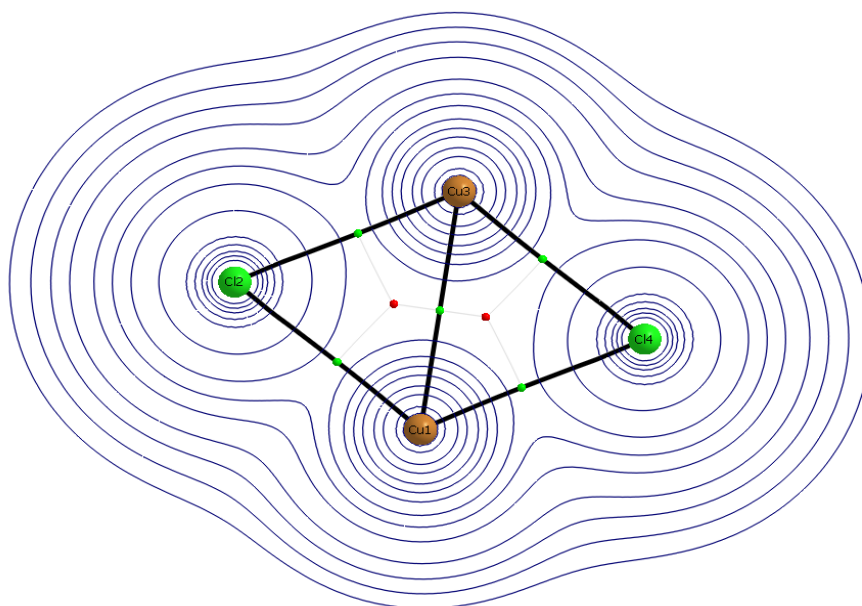


Рис. 1. Поверхня потенціалу електронної густини $[\text{Cu}^+_2\text{Cl}_2]$

Це додатково підтверджує наявність мінімуму електронної густини у вигляді критичної точки $(3;+1)$. (на рис.2 позначена жовтим). Цей факт опосередковано говорить про те, що $d\pi-p\pi$ -зв'язування молекул малеїнової кислоти в різних депротонованих формах з іонами Cu^+ гальмує димеризацію іонів Cu^+ і створює більш сприятливі умови для створення комплексів купруму (I).

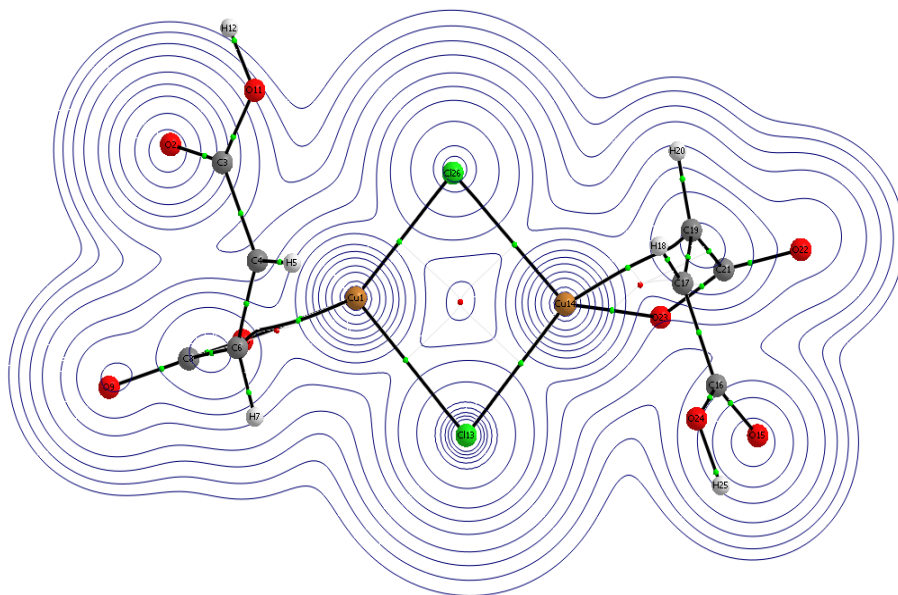


Рис. 2. Поверхня потенціалу електронної густини $[\text{Cu}^+_2\text{Cl}_2(\pi\text{HM}^-)_2]$

Порівнюючи енергії зв'язування Cu^+ з C=C-фрагментом кислоти за табл. 1. видно, що середнє значення енергії зв'язування (Cu⁺-C)-зв'язку для кластеру з молекулярною формою малеїнової кислоти є на 36 кДж/моль вищою, ніж для кластерів з депротонованою формою малеїнової кислоти. При цьому різниця середнього значення енергії зв'язування (Cu⁺-C)-зв'язку між $[\text{Cu}^+_2\text{Cl}_2(\pi\text{HM}^-)_2]$ та $[\text{Cu}^+_2\text{Cl}_2(\pi\text{M}^{2-})_2]$ становить лише 1 кДж/моль, що є в рамках теплового руху молекул. Крім того, слід відмітити, що в залежності від ступеня депротопації кислоти, залежить внесок dπ-рπ-зв'язування в загальну енергію зв'язування іону Cu^+ з малеїновою кислотою. Через те, що в депротонованих формах кислоти з'являються σ-зв'язки. Для $[\text{Cu}^+_2\text{Cl}_2(\pi\text{H}_2\text{M})_2]$ цей внесок складає 100%, оскільки H_2M не утворює σ-зв'язків (Cu^+ з $^-{\text{OOC}}$) з іонами Cu^+ , для $[\text{Cu}^+_2\text{Cl}_2(\pi\text{HM}^-)_2]$ та $[\text{Cu}^+_2\text{Cl}_2(\pi\text{M}^{2-})_2]$ внесок складає 47% та 45%, відповідно. За табл.1 також видно, зменшення ефективного заряду центрального атома в залежності від ступеня дисоціації малеїнової кислоти

у внутрішній сфері комплексу. При цьому порівнюючи $[\text{Cu}^+_2\text{Cl}_2(\pi\text{H}_2\text{M})_2]$ та $[\text{Cu}^+_2\text{Cl}_2(\pi\text{HM}^-)_2]$ спостерігається стрибкоподібне зменшення заряду.

Табл. 1. Середні значення енергій зв'язування та ефективного заряду центрального іону для кластерів $[\text{Cu}^+_2\text{Cl}_2(\pi\text{L})_2]$

Кластери	$E_b(\text{Cu}-\text{Cl})$	$E_b(\text{Cu}-\text{C})$	$z_{\text{eff}}(\text{Cu})$
	кДж/моль		
$[\text{Cu}^+_2\text{Cl}_2(\pi\text{H}_2\text{M})_2]$	-94,84	-129,4	0,632
$[\text{Cu}^+_2\text{Cl}_2(\pi\text{HM}^-)_2]$	-94,02	-93,71	0,532
$[\text{Cu}^+_2\text{Cl}_2(\pi\text{M}^{2-})_2]$	-94,20	-92,69	0,506

Дані цієї роботи можуть бути використані для подальшого моделювання хімічних та електродних реакцій за участі досліджуваних кластерів. А також можуть бути використані для інтерпретації складу синтезованих композитів.

Перелік посилань

1. Мікробіологічні властивості дисперсії на основі міді, отриманої катодним осадженням у присутності акрилової кислоти / В. Ф. Варгалюк, В. А. Полонський, Н. Д. Стець, О. С. Стець, А. І. Щукін // Вісн. Дніпропетр.ун-ту. Серія Хімія. – 2014. – Т. 22, № 2. – С. 47–17.
2. Slyvka Y. I. Copper(I) chloride π -complexes with 2,5-bis(allylthio)-1,3,4 thiadiazole: synthesis and structural features / Y. I. Slyvka, B. R. Ardan, M. G. Myskiv // Journal of Structural Chemistry. – 2018. – Vol. 59. – P. 388–394.
3. Kurasova Y. D. Quantum chemical modeling of aquachlorocomplexes of Cu^+ with acrylic, maleic and fumaric acids / Y. D. Kurasova, V. F. Vargalyuk, V. A. Polonsky // Journal of Chemistry and Technologies. – 2022. – Vol. 30, No 4. – P. 530–536.
4. Cortés-guzmán F. Complementarity of QTAIM and MO theory in the study of bonding in donor–acceptor complexes / F. Cortés-guzmán, R. F. W. Bader // Coordination Chemistry Reviews, 2005. – Vol. 249, No 5–6. – P. 633–662.
5. Features of (d π -p π)-binding of Cu(I) ions with acrylic, maleic and fumaric acids in aqueous solution / V.F. Vargalyuk, Y. S. Osokin, V. A. Polonsky, V. N. Glushkov // Journal of Chemistry and Technologies. – 2019. – Vol. 27. – P. 148–157.

ТЕОРЕТИЧНЕ ТА ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНЕ ВИЗНАЧЕННЯ ТЕРМОДИНАМІЧНИХ ХАРАКТЕРИСТИК

РЕДОКС–СИСТЕМИ $\text{Cu}^{2+}(\text{L})/\text{Cu}^+(\text{L})$

Лагута О. В., Пустильнік С. В., Варгалюк В. Ф., Полонський В. А.

Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара,

49010, г. Дніпро, пр-т Гагаріна, 72

В [1] було показано, що існує чітка кореляційна залежність між енергетичним ефектом електронного переходу (ΔE_e) в аквакомплексах перехідних металів, визначених на основі квантово-хімічних розрахунків, і відповідною величиною стандартного потенціалу $E_0 = a + b (\Delta E_e)$. За рахунок використання авторами методу поляризаційного континууму у поєднанні з DFT - теорією, константа кореляційної прямої $E_0 = f(\Delta E_e)$ для катіонів 3d-металів набула високого рівня (0,9942). Це дозволило отримувати надійну кількісну інформацію про термодинаміку електрохімічних реакцій аквакомплексів перехідних металів на основі теоретичних розрахунків.

Ми зважили за доцільне перевірити можливість застосування кореляційної залежності $E_0 = f(\Delta E_e)$ у однорідних аквакомплексів до відповідних монозаміщених органічними лігандами аквакомплексів. У якості об'єкта дослідження обрали редокс–систему $[\text{Cu}^{2+}(\text{HM}^-)(\text{H}_2\text{O})_n]/[\text{Cu}^+(\text{HM}^-)(\text{H}_2\text{O})_n]$, де HM^- це однозарядний аніон малеїнової кислоти.

Квантово-хімічні розрахунки комплексів $[\text{Cu}^{2+}(\text{HM}^-)(\text{H}_2\text{O})_n]$ і $[\text{Cu}^+(\text{HM}^-)(\text{H}_2\text{O})_n]$ виконували з використанням програмного забезпечення Gaussian 09, AIM 2000, Chemcraft 1.8, Gauss Viever 5.0. Методологія розрахунків детально описана в [2].

Результати розрахунків представлені в таблиці 1.

Виявилось, що Cu^+ йони крім однозарядного йона малеїнової кислоти можуть утримувати у внутрішній координаційній сфері не більше трьох молекул води, а комплекси Cu^{2+} з малим вмістом води ($n < 3$) енергетично не вигідні.

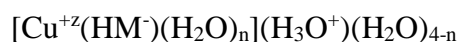
Тому у якості найбільш вірогідної редокс – системи ми обрали $[\text{Cu}^{2+}(\text{HM}^-)(\text{H}_2\text{O})_3]/[\text{Cu}^+(\text{HM}^-)(\text{H}_2\text{O})_3]$. Для неї $\Delta E_e = 0,17084 \text{ eV} = 448,46 \text{ кДж/моль}$. Підставивши це значення до кореляційної залежності

$$E_0 = -4.082 + 0.009 \Delta E_e,$$

XXI Всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань сучасної хімії, Дніпро, 22-25 травня 2023 р.

ми отримали $E_0 = -0.046 \text{ В (н.в.е.)} = -0.247 \text{ В (х.с.е.)}$.

Таблиця 1. Значення повної електронної енергії (E_e , хартрі) кластерів



n	z=+2	z=+1
0	-2478.01982	-2478.23475
1	-2478.07301	-2478.27199
2	-2478.10924	-2478.28580
3	-2478.13256	-2478.30340
4	-2478.14832	—

Для експериментального визначення E_0 ми створили відповідну редокс - систему шляхом дозованого відновлення Cu^{2+} йонів металевим цинком. В отриманих розчинах об'ємом 50 мл вимірювали рівноважний потенціал індиферентного (Pt) електрода відносно хлоридсрібного електрода порівняння. Результати вимірів представлені в таблиці 2.

За даними таблиці 2, використовуючи рівняння Нернста, знаходимо $E_0 = 0,074 \text{ В}$. Як видно, експериментальне значення E_0 суттєво відрізняється від теоретичного ($-0,247 \text{ В}$).

Таблиця 1. Значення рівноважного потенціалу платинового електрода, виміряного у розчинах 0,01 моль CuSO_4 + X моль Zn (pH = 2).

v (Zn), моль	0,00015	0,00030	0,00060
v (Cu^{2+}), моль	0,0097	0,0094	0,0088
v (Cu^+), моль	0,0003	0,0006	0,0012
E_0 , В (х.с.е.)	0,167	0,142	0,123

Для перевірки надійності експериментальних вимірів ми скористались записом рівняння Нернста для комплексних електролітів

$$E = E_0(\text{aq}) + (2,3RT/nF) \cdot \lg \{ K(\text{Cu}^+\text{L}) \cdot C(\text{Cu}^{2+\text{L}}) / K(\text{Cu}^{2+\text{L}}) \cdot C(\text{Cu}^+\text{L}) \}.$$

Тут $E_0(\text{aq})$ – стандартний потенціал для редокс-системи з однорідних аквакомплексів Cu^{2+} і Cu^+ , $K(\text{Cu}^+\text{L})$ і $K(\text{Cu}^{2+}\text{L})$ – константи стійкості відповідних комплексів з органічними лігандами, $C(\text{Cu}^{2+}\text{L})$ і $C(\text{Cu}^+\text{L})$ – їх концентрації.

Для комплексів купруму з однозарядними аніонами малеїнової кислоти $K(\text{Cu}^+\text{L}) = 1,2 \cdot 10^4$ [3], $K(\text{Cu}^{2+}\text{L}) = 2,5 \cdot 10^3$ [4].

Розрахунки показали, що знайдене таким чином значення стандартного потенціалу всього на 0,02 В відрізняється від його табличного значення.

Щоб зрозуміти причину навіть такого відхилення, ми співставили теоретичну і експериментальну різницю рівноважних потенціалів, яка не залежить ні від E_0 , ні від K . Виявилось, що тут відхилення E становить всього 0,001 В. Це вказує на те, що отримане нами відхилення в 0,02 В для E_0 пов'язане з недостатньою точністю визначення наведених в літературних джерелах величин K .

Представлені результати дозволяють стверджувати, що кореляційні залежності $E_0 = f(\Delta E_e)$ реалізуються тільки у межах однакового лігандного оточення центрального атома.

Перелік посилань

1. Середюк В. А. Оценка надежности квантово-химических расчетов электронных переходов в аквакомплексах переходных металлов / В. А. Середюк, В. Ф. Варгалюк // Электрохимия. – 2008. – Т. 44. – № 10. – с. 20-27.

2. Варгалюк В. Ф. Утворення π -комплексів атомів купруму з акриловою, малеїновою та фумаровою кислотами у водному середовищі / В. Ф. Варгалюк, Є. С. Осокін, В. А. Полонський // Journal of Chemistry and Technologies. – 2020. – Vol. 8. – № 2. – P. 153-160.

3. Kamau P. Formation Constants of Copper(I) – Olefin Complexes in Aqueous Solution/ P. Kamau, R. Jordan // Inorganic chemistry. – 2002. – V.41. – № 4. – P. 884-891.

4. С. А. Бычкова, А. Г. Атровцева, Е. В. Козловский, Н.В. Тукумова, В.А. Шарнин, Исследование комплексообразующих свойств дикарбоновых кислот с ионами меди (II), ИГХТУ, матеріали Чугаївської конференції з координаційної хімії. – 2005. – с.95.

ВИКОРИСТАННЯ ГАЗОВИХ СЕНСОРІВ ДЛЯ ВИЗНАЧЕННЯ ВМІСТУ ТОКСИЧНИХ ГАЗІВ В АТМОСФЕРНОМУ ПОВІТРІ

¹Мосейчук Т. О., ²Ковальчук М. О., Аксіментьєва О. І., ¹ Мартинюк Г. В., ¹ Яцков М. В.

¹*ВСП «Рівненський технічний фаховий коледж Національного університету водного господарства і природокористування»*

вул. Орлова, 35, м. Рівне, 33017, Україна

²*Рівненський ліцей «ЛДЕР»*

вул. Гайдамацька, 7а, Рівне, 33003, Україна

³ *Львівський національний університет ім. Івана Франка*

В умовах повномасштабної війни в країні гостро стоїть питання забруднення довкілля вибухами боєприпасів і численними пожежами, які їх супроводжують. Военні дії несуть небезпеку життю та здоров'ю громадян та природі України. Встановлено, що найбільшої шкоди довкіллю завдають численні боєприпаси, продукти розпаду яких провокують хімічне отруєння навколишнього середовища. Проте ще більші ризики для навколишнього середовища створює не сама детонація снарядів, а влучання в промислові чи хімічні об'єкти, спричиняючи численні пожежі. Під час детонації ракет та артилерійських снарядів утворюється низка хімічних сполук: сполук карбону, сульфур, водяна пара, оксиди нітрогену, аміак, пари ціанистоводневої кислоти та інші [1]. У реальних умовах продукти вибуху боєприпасів можуть взаємодіяти з ґрунтовими водами, з вологою повітря та киснем, а також між собою. Тому кінцевий хімічний склад продуктів спрацювання боєприпасів буде завжди різним і непередбачуваним залежно від умов вибухів.

На даний час відсутня систематична інформація щодо стану атмосферного повітря, особливо в районах бойових дій. Основною метою науково-технічних пошуків і розробок є знаходження найбільш швидких та відносно недорогих методів виявлення небезпечних газів в умовах різкого техногенного забруднення [2,3]. Особливо актуальними є візуальні (кольорові) індикатори та оптичні сенсори, які можна було б використовувати у «польових умовах» для моніторингу стану довкілля, а також для

визначення якості продуктів харчування. Одним з найперспективніших сенсорних середовищ для проведення моніторингу токсичних газів сьогодні вважають газочутливі плівки на основі спряжених полімерів з власною електронною провідністю – поліанілін (ПАН) та його похідні: поліортотолуїдин (ПоТІ), поліанізидин (ПоА) [4].

Встановлено, що плівки поліаміноаренів (ПАН, ПоТІ, ПоА) під впливом полярних газів, зокрема аміаку, виявляють газохромний ефект – зміна забарвлення (або його інтенсивності) при взаємодії сенсорної плівки з молекулами газів. Тому було запропоновано створити чутливий елемент газового сенсора для виявлення сполук нітрогену на прикладі аміаку [4]. Методом електрохімічної полімеризації з кислих розчинів відповідних мономерів при кімнатній температурі в електрохімічній комірці формували тонкі плівки ПАН та ПоТІ з використанням електродів: робочий – у вигляді скляних пластинок розміром (10*20*2мм), покритих оксидом SnO₂ або ІТО; допоміжний – платинова сітка. В результаті електрохімічного осадження отримані компактні, однорідні плівки ПАН та ПоТІ контрольованої товщини в результаті 5 – 15 циклів розгортки потенціалу між $E = 0 \dots 1,0$ В, які були взяті за основу створення чутливого елемента оптичного сенсора щодо виявлення аміаку [4].

Для визначення впливу аміачного середовища досліджувані плівкові зразки поміщали в герметичну кварцову камеру фотоелектроколориметра КФК-3 і вимірювали оптичні спектри сенсорних плівок. Аміачне середовище створювалось напусканням в камеру аміаку з газового балону. Для отримання дуже малих концентрацій індикаторного газу аміачне середовище створювалось над розчином аміаку відповідної концентрації. Оптичні властивості «вільних плівок» поліаміноаренів досліджували на оптично-прозорих поверхнях (скло або кварц) використовуючи довжини хвиль ближнього УФ, видимого і ближнього ІЧ-діапазону.

З'ясовано, що в початковий момент плівка має інтенсивний яскраво-зелений колір і зберігає його впродовж всього часу при відсутності газу. Цьому кольору відповідає спектр з максимумом поглинання при $\lambda = 760-780$ нм. При подачі аміаку в камеру відбувається різка зміна не тільки оптичного поглинання, але й кольору плівки, що виявляється у значному зсуві максимуму поглинання та зміні загального контуру спектру, а саме виникає широка смуга оптичного поглинання з максимумом біля 600 нм, і одночасно зменшуються інтенсивності смуг поглинання при 800 і 450 нм. Це

явище використано для конструювання кольорового індикатора визначення вмісту аміаку. При цьому встановлено, що сенсор реагує на початкові моменти зростання вмісту аміаку із чутливістю 0,01 Па. У випадку більших концентрацій аміаку колір плівки значно послаблюється від світло-синього до блідо-блакитного. Наявність замісників у молекулі поліаміноарену зумовить зростання набору кольорів, які будуть супроводжувати дію газових сенсорів. Швидкість роботи датчика (сенсора) на основі полімерних плівок ПА залежить від температури, тиску і в цілому коливається від кількох секунд до кількох хвилин [2, 4].

Відновлення властивостей індикаторних плівок з метою їх багаторазового використання в газових сенсорах здійснюють промиванням у водному розчині 0,5М сульфатної кислоти та воді протягом 10–20 секунд або продуванням теплим повітрям. При цьому колір плівки відновлюється до яскраво-зеленого і такий індикатор придатний до повторного використання в газових сенсорах. Завдяки повній регенерації композиційні плівки на основі спряжених поліаміноаренів можна використовувати як одноразові сенсори виявлення аміаку при моніторингу навколишнього середовища.

Отже, на основі дослідження впливу концентрації (тиску) нітрогеновмісних речовин (аміаку) на оптичне пропускання тонких плівок поліаміноаренів запропоновано газовий експрес-індикатор для виявлення різних газів та газових сумішей в навколишньому середовищі чи досліджуваній зоні повітря. Матеріал і технологія виготовлення чутливого елемента підбирається залежно від складу досліджуваного газу.

Література

1. E. A. Simonov, O. Vasyliuk, Y. Spinova. Журнал про екологічні наслідки війни. Ukraine war environmental consequences work group. Випуск 2. Українською. July 2022. Project.
2. О. Аксіментьєва, Б. Ціж, М. Чохань. Сенсори контролю газових середовищ у харчовій промисловості та доквіллі: монографія. – Львів: Піраміда, 2017. – 284 с.
3. S. Pandey. Highly sensitive and selective chemiresistor gas/vapor sensors based on polyaniline nanocomposite: A comprehensive review. Journal of Science: Advanced Materials and Devices. 2016, Vol. 1 (4). P. 431–453. DOI: 10.1016/j.jsamd.2016.10.005
4. O.I. Aksimentyeva, B. R. Tsizh, Yu. Yu Horbenko, O.I. Konopelnyk, G.V. Martynyuk, M.I. Chokhan. Flexible elements of gas sensors based on conjugated polyaminoarenes Molecular Crystals and Liquid Crystals, 2019. Vol. 670. №1. P. 3–10. <https://doi.org/10.1080/15421406.2018.1542057>.

ОСОБЛИВОСТІ ЕЛЕКТРОХІМІЧНОГО ОСАДЖЕННЯ ПЛІВОК НА ОСНОВІ МАЛЕЇНОВОЇ КИСЛОТИ ТА Mn^{2+}

Кучай І. М., Плясовська К. А., Варгалюк В. Ф.

Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара,

пр. Гагаріна, 72, 49010, Дніпро, Україна

kuchay_i_n@ukr.net

Сучасні технології мають тенденцію до оптимізації приладів у бік мінімізації розмірів за умови збереження робочої ефективності. У зв'язку з цим значного розвитку набули технології одержання матеріалів у вигляді тонких плівок для виготовлення електронних пристроїв, оптичних покриттів, твердих покриттів для інструментів і декоративних деталей. Тому розробка нових методів одержання тонкоплівочних матеріалів є актуальною задачею сучасної науки.

Тонкоплівкова технологія базується на складних фізико-хімічних процесах і застосуванні різних матеріалів та діелектриків. Одним із методів нанесення тонкоплівкових покриттів, які зараз інтенсивно розвиваються, є електрохімічні методи. У такий спосіб можна осаджувати плівки різного складу: не тільки металеві покриття, оксиди та інші неорганічні сполуки, але й матеріали органічного походження та композиційні матеріали. Композитні тонкі плівки, які містять оксиди мангану та органічний компонент, мають унікальні властивості, можуть бути використані для створення каталізаторів та суперконденсаторів [1].

Нами, був розроблений електроліт для анодного осадження малеїнатних покриттів зі вмістом оксидів мангану. Встановлений вплив таких факторів як показник рН, температура, густина струму. Критеріями для оптимізації режиму електролізу обрані такі фактори, як зовнішній вигляд плівок, їх зчеплення з основою та маса осаду.

Оптимальне співвідношення Mn^{2+} : малеїнова кислота складає 1 : 3, в якості фонового електроліту виступає перхлорат натрію. Осадження з сильноокислих розчинів не призводить до формування стійких та щільних плівок, тому після нагрівання до 60–65 °С необхідно здійснити підлужнення розчину до рН 2,5–3,0. За цих умов можливе утворення частинок окисненого мангану до тієї форми, що можна осідати на аноді. Іноді спостерігається тимчасове утворення гелеподібних гідроксидів мангану, яка швидко розчиняється в гарячому розчині.

Таблиця. – Змінення характеристик покриття в залежності від часу електролізу за $i = 3 \text{ mA/cm}^2$

t, хв	Q, мКл/см ²	Зовнішній вигляд осаду	Δ m, г
5	900	Чорний щільний шар, добре тримається на основі	0,0753
15	2700	Чорний щільний шар, добре тримається на основі	0,0817
30	5400	Чорний щільний шар, добре тримається на основі	0,1169
45	8100	Покриття розтріскується після висихання, часткове відлущення	0,0828
60	10800	Покриття розтріскується після висихання, не тримається на поверхні пластини	--

Температурний режим визначили за критеріями якості покриття та його адгезії до підложки, з'ясовано, що оптимальним є інтервал температур 60–70⁰ С. Робочу густину анодного струму встановлювали в інтервалі від 1 до 5 мА/см². Інтервал $i = 0,5–1 \text{ mA/cm}^2$, що був оптимальним для осадження плівок оксидів мангану з розчинів акрилової кислоти,

виявився неефективним: осадження плівки майже не спостерігався, а манган з розчину виділявся на катоді. В інтервалі $i = 4\text{--}5 \text{ мА/см}^2$ і більше швидко формуються поруваті плівки з поганою адгезією до підложки. Оптимальним інтервалом для осадження плівок МК– Mn^{2+} є $i = 2\text{--}3 \text{ мА/см}^2$. Деякі якісні та кількісні характеристики плівок в залежності від умов електролізу наведена у табл.

Отримані з даного електроліту плівки на сталевій основі мають вигляд, наведений на рисунку.



Рисунок. – Зовнішній вигляд плівок зі вмістом оксидів мангану та maleїнової кислоти, отриманий за $i = 3 \text{ мА/см}^2$ впродовж 15 хв із розробленого електроліту.

Таким чином, встановлено склад електроліту, густину струму та час електролізу, які дозволяють отримати плівки зі вмістом оксидів мангану та maleїнової кислоти задовільної якості.

Використана література

1. Полтавець В. В. Електрохімічне формування та властивості електродних матеріалів на основі MnO_2 / В. В. Полтавець. – Дис. канд. хім. наук, 2019. – 147 с.

ПРО МОЖЛИВОСТІ ПЕРЕТВОРЕННЯ ШКІДЛИВОГО КАРБОН (IV) ОКСИДУ В КОРИСНІ ХІМІЧНІ СПОЛУКИ.

Пешук Є.С., Денисенко Т.О.

*Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара,
пр. Гагаріна, 72, 49010, Дніпро, Україна*

Вуглекислий газ (CO_2) є відповідальним за збереження теплового випромінювання від поверхні Землі, тому його відносять до групи «парникових» газів. CO_2 може утворюватись природнім шляхом і тоді його концентрація регулюється шляхом фотосинтезу живими організмами. Він також вивільняється при використанні викопного палива і тоді CO_2 є антропогенним забруднювачем. Стрімке зростання антропогенних викидів CO_2 викликає глобальне потепління, що обумовлює основну причину зміни клімату. Для зменшення негативного впливу CO_2 на довкілля використовують стратегію його уловлювання. Станом на 2019 рік у світі діяли 17 проектів із технологією уловлювання та зберігання CO_2 , які дозволяють щорічно вловити приблизно 31,5 Мт CO_2 , з яких 3,7 Мт зберігається у підземних сховищах геологічних формацій. Уловлений CO_2 може стати важливою складовою в ланцюжку безвідходного виробництва в різних галузях промисловості. CO_2 є нетоксичним, доступним, недорогим та поширеним агентом, який підтримує такі показники, як енергозбереження, екологічність, оборотність, біосумісність, тощо. Обмеження, які виникають при застосуванні CO_2 обумовлені його термодинамічною стабільністю, неполярністю молекули CO_2 , слабкою кислотністю та кінетичною інертністю. Як наслідок, активація молекули CO_2 при хімічних перетвореннях можлива лише за умов високого тиску і температури.

Зазвичай для уловлювання CO_2 використовують процеси його термохімічного перетворення: спалювання, піролізу, газифікації, абсорбції, хемосорбції, тощо. Новітньою стратегією, яка знаходиться на стадії розробки, є технологія хімічного поглинання CO_2 , що застосовує іонні рідини на основі аміногруп, азолатні іонні рідини, фенолятні іонні рідини, іонні рідини з подвійною функціоналізацією, іонні рідини, що містять піридин, тощо. Головними перевагами цих систем є збільшення ефективності використання енергоресурсів та зменшення енергозатрат; можливість повторного використання розчинів алканоламінів, висока здатність до поглинання CO_2 та відмінна оборотність. До суттєвих недоліків відносяться корозійність, токсичність, дороговизна, складнощі, що виникають при синтезі іонних рідин. Можливості, які окреслюють технології іонних рідин, описані в літературі [1], вказують на те, що у майбутньому вони зможуть не тільки використовуватися на ряду з твердими сорбентами, а й конкурувати з ними. Наразі для уловлювання CO_2 широко застосовують тверди сорбенти на основі пористих органічних полімерів, метал-органічних матеріалів, цеолітів, вуглецевих матеріалів та графену [2]. Пористі матеріали ідеально підходять для накопичення великих кількостей CO_2 за низького тиску. Тому, що вони володіють надзвичайно розвиненою питомою поверхнею, об'ємом і розміром пор, що відповідають мікропористій області, а також високою поверхневою активністю. Для більшої ефективності адсорбенти додатково посилюють функціоналізацією поверхні CO_2 -фільними групами, які містять Нітроген або катіони лужних або лужно-земельних металів. Окрім зазначених адсорбентів використовують також «зелені» адсорбенти, які отримують з вторинної сировини: горіхової шкаралупи, деревних і харчових залишків (адсорбенти на основі Карбону), промислових відходів (адсорбенти на основі Кремнію), ячної шкаралупи, та риб'ячих кісток (адсорбенти на основі CaO) [3].

Використовуючи економічно ефективні і безпечні для навколишнього середовища біологічні, термохімічні, електрохімічні, фотохімічні, фотоелектрохімічні та фототермічні процеси, уловлений CO_2 можна перетворити на корисні продукти, такі як чисте паливо та корисні хімічні речовини, які легко транспортувати та зберігати. Одним із популярніших і добре вивчених процесів є перетворення шкідливого для навколишнього середовища CO_2 на корисний продукт метан, який є відомим джерелом енергії. Важливість процесу метанізації CO_2 обумовлена необхідністю переходу до відновлюваного джерела енергії з викопного палива, запаси якого невпинно скорочуються. Процес перетворення CO_2 на метан відбувається у результаті електрокаталітичного, біоелектрокаталітичного і фотокаталітичного відновлення з використанням поверхні графену та каталізаторів на основі сполук Купруму (II), мікроорганізмів, сполук благородних або амфотерних металів (Ni, TiO_2 , т.п.). Уловлений CO_2 також може бути використаний для отримання метанолу, диметилового ефіру та похідних продуктів. Таким чином реалізується стратегія, коли замість вуглецевого палива використовуються вуглеводневі продукти. В синтезі полімерів уловлений CO_2 широко застосовують, як триггер. Сприйнятливості полімерів до CO_2 реалізується шляхом включення CO_2 -чутливих функціональних груп вздовж полімерних ланцюгів. Для цього використовують поверхнево-активні речовини, які містять амідини, аміни та гуанідини, та проявляють лужні властивості. Вони реагують з вугільною кислотою, утвореною при розчиненні CO_2 у воді або водних органічних розчинників, та зв'язують CO_2 . Основною перевагою таких систем є хороша оборненість. Отримані полімерні матеріали можна використати для уловлювання CO_2 , а також у якості датчиків, які дозволяють контролювати вміст CO_2 . Іншим прикладом використання CO_2 , як триггеру, є отримання самовідновлюваного гідрогелю, принцип дії якого полягає в циклічному багаторазовому та оборотному переході золь-гель. Так при барботуванні золю CO_2 відбувається перехід золю-гель, що супроводжується утворенням червоподібних міцел. Після видалення CO_2 гідрогель повертається до початкового стану золю. Прикладом застосування самовідновлюваних гідрогелів є отримання «розумних» полімерів, які здатні збільшити ступінь вилучення нафтопродуктів з первинної сировини.

Отже сучасні стратегії розвитку хімічної галузі, які базуються на принципах «зеленої» хімії, покликані знизити негативний вплив хімічних речовин на навколишнє середовище шляхом уловлюванням CO_2 за допомогою використання модифікованих пористих твердих сорбентів та каталізаторів на основі ПАР, які містять CO_2 -гідрофільні групи. Уловлений CO_2 застосовують для виробництва чистого палива (метану), тим самим сприяють збереження природних ресурсів, та в синтезі «живих» полімерів, «розумних» латексів, самовідновлювальних гелів, підтримуючи концепцію перетворення шкідливого CO_2 в корисне. Перелічені фактори сприяють створенню безвідходних виробництв замкнутого циклу, які не спричиняють шкоди довкіллю.

Літературні посилання:

1. Cui G., Wang J., Zhangb S. Active chemisorption sites in functionalized ionic liquids for carbon capture // *Chem. Soc. Rev.* 2016. Vol. 45. P. 4307-4339. <https://doi.org/10.1039/C5CS00462D>
2. Singh G., Lee J., Karakoti Aj., Bahadur R., Yi J., Zhao D., AlBahilyc Kh., Vinu Aj. Emerging trends in porous materials for CO_2 capture and conversion // *Chem. Soc. Rev.*, 2020. Vol. 49. 3. 4360-4404. <https://doi.org/10.1039/D0CS00075B>
3. Wang J., Huang L., Yang R., Zhang Zh., Wu J., Gao Y., Wang Q., O'Hare D., Zhong Z. Recent advances in solid sorbents for CO_2 capture and new development trends // *Energy Environ. Sci.* 2014. Vol. 7. P. 3478-3518. <https://doi.org/10.1039/C4EE01647E>

Секція

ХАРЧОВА ХІМІЯ ТА СУЧАСНІ ХАРЧОВІ ТЕХНОЛОГІЇ

Керівник: доц., канд. хім. наук Кондратюк
Наталія Вячеславівна

Секретар: доц., канд. хім. наук Чернушенко
Олена Олександрівна

ШЛЯХИ ПРОФІЛАКТИКИ ІНТОКСИКАЦІЇ РОБІТНИКІВ ЩО КОНТАКТУЮТЬ З ХРОМОМ

Агаян А.Р., Чернушенко О.О.

*Дніпровський національний університет ім. Олеся Гончара,
пр. Гагаріна 72, м. Дніпро 49010, Україна*

У всьому світі велика кількість працівників різних галузей піддаються впливу парів, туману і пилу, що містять Хром та його сполуки. Вплив сполук шестивалентного хрому може виникнути під час виробництва хроматів, зварювання, виробництва хромових пігментів, під час хромування та фарбування розпиленням. При забрудненні робочої зони Хром і його сполуками можуть у підвищених кількостях надходити в організм інгаляційно та шляхом резорбції з поверхні шкіри. Залежно від шляхів проникнення Хрому в організм людини та від ступеня окислення його у сполуках залежить тяжкість інтоксикації, так сполуки Хрому (VI) за токсичністю подібні Кадмію та, в додаток є сильними окисниками. Сполуки шестивалентного Хрому чинять на організм людини загальнотоксичну, кумулятивну, алергенну, канцерогенну і мутагенну дію.

Існує достатньо свідчень щодо канцерогенності сполук Хрому (VI), що зустрічаються при виробництві хроматів, хромових пігментів і при хромуванні. Робоча група IARC надала загальну оцінку токсичності сполук Хрому (VI), вони є канцерогенними для людини (група 1). Металевий Хром та сполуки Хрому (III) не належить до канцерогенів для людини (група 3).

При роботі з Хромом необхідно дотримуватися низки профілактичних заходів. Всі працівники з хромом, хромовою кислотою, хроматами, біхроматами та сплавами, що містять Хром, повинні проходити медичні огляди один раз на рік. Всі працівники з Хромом повинні отримувати лікувально-профілактичне харчування (безкоштовні гарячі сніданки, вітамінні препарати). Раціони лікувально-профілактичного харчування робітників заводу хромових сполук скеровані на обмеження повареної солі, солених, жирних продуктів та жиру, калорійність 1482 ккал.

Для працівників, що контактують при роботі зі сполуками Хрому раціон для робітників збагачують амінокислотами (метіоніном, цистеїном, лізином, тирозином,

фенілаланіном), вживають щоденно 100 мг аскорбінової кислоти, 2 мг ретинолу, 15 мг ніацину (вітамін В3 або РР), 25 мг S-метилметіоніну (вітамін U), 100 мл мінеральної столової води Нарзан. Додатково: вітаміни А, РР, Е. В раціоні 30 % повинні складати рослинні жири. Співвідношення білки, жири, вуглеводи повинно бути як 1 : 1 : 3. Цей раціон впливає на регуляторні системи організму (нервову та ендокринну). Він має забезпечувати гіпоалергенну спрямованість. До раціону включаються білки з підвищеним вмістом сірковмісних амінокислот (але низьким вмістом триптофану та гістидіну) та лецитинів (м'ясо кролика, печінка, нерафіновані рослинні олії, сметана, вершки); солі Са, Mg, сірки; фосфати, пектини, органічні кислоти, продукти лужної орієнтації (молоко, овочі, фрукти, ягоди). Рекомендуються відварені та парові страви. У раціоні обмежують вміст продуктів - багатих джерел щавлевої кислоти, хлору та натрію, а також речовин, що посилюють усмоктування алергенних речовин у кров, тобто солених та маринованих овочів, яєць, суниць, шоколаду, деяких риб (скумбрія), складних соусів, бобів, полуниці, малини, какао, гострих та екстрактивних речовин .

Введення аскорбінової кислоти знижує накопичення Хрому в органах і зменшує пошкодження печінки та нирок. Вітамін С, який сильним антиоксидантом, захищає тканини від дії Cr (VI), пошкодження ДНК, утворюючи інертний комплекс Cr (III) з вітаміном С.

Використання суміші овочевих та плодових пюре з високим вмістом вітамінів С, Е, А та каротинів), що мають антитоксичні та антиоксидантні властивості й можна рекомендувати у поєднанні з гіпербаричною оксигенацією як лікувально-профілактичний засіб для працівників з Хромом.

Цистеїн підсилюють детоксикацію хроматів шляхом його відновлення до тривалентного хрому, знижують мутаційні перетворення у робітників, які контактують з важкими металами. Глутатіон відіграє важливу роль у внутрішньоклітинному відновленні Cr (VI) до Cr (III), за рахунок меркаптогрупи цистеїну, що входить до складу трипептиду.

Таким чином доцільним є рекомендації використання в лікувально-профілактичному харчування робітників що контактують зі сполуками Хрому(VI) сировини багатой на сірковмісні амінокислоти, пептиди та білки. Багаті на цистеїн соя, насіння соняшника, горох та борошно пшениці грубого помелу. Рекомендовано

використання в профілактичному харчуванні борошняних виробів з сої, кукурудзи, гречки та пшениці грубого помелу, багатих на сірковмісні амінокислоти. Борошна мають добре забалансований амінокислотний склад. Пшеничне борошно грубого помелу поступається борошну сої та гречки по вмісту лізину, але перевищують за вмістом сірковмісних амінокислот, що робить цього цінним при сумісному використанні з іншою білковою сировиною.

Хоча амінокислота цистеїн, що міститься в багатьох харчових продуктах, вона має властивість руйнуватися при тепловій обробці. Тому повністю задовольнити добову норму цистеїну з їжі неможливо. Тому рекомендацією для робітників що працюють зі сполуками Хрому є додаткове профілактичне вживання капсульованої амінокислоти цистеїну або трипептиду глутатіону, до складу якого входить залишок цистеїну.

Література

1. Розенберг М.С., Ромова Е.Г., Помилуйко Ю.Б. К некоторым вопросам организации лечебно-профилактического питания рабочих завода хромовых соединений. Патогенез, клиника, лечение профзаболеваний: Сб. ст. Актюбинского мед. ин-та. Актюбинск, 1977. С. 84 – 87.

2. Стефанюк В.Д. Інтоксикація хромом та його сполуками: лікування, профілактика. *Современные проблемы токсикологии*. 2001.Т. 1. http://medved.kiev.ua/arhiv_mg/st_2001/01_1_13.htm.

3. Goulart M., Batoréu M.C., Rodrigues A.S., Laires A., Rueff J. Lipoperoxidation products and thiol antioxidants in chromium exposed workers. *Mutagenesis*, 2005, 20(5), P. 311 – 315, <https://doi.org/10.1093/mutage/gei043>.

ВПЛИВ ФОРМУЛИ ЕТАЛОННОГО БІЛКА НА ПОКАЗНИКИ БІОЛОГІЧНОЇ ЦІННОСТІ БІЛКОВОЇ ПРОДУКЦІЇ

Журида Ю.В., Чернушенко О.О.

*Дніпровський національний університет ім. Олеся Гончара,
пр. Гагаріна 72, м. Дніпро 49010, Україна*

Для більшості країн світу проблеми дефіциту білка для мешканців призводять до пошуку нових методів збагачення ним продуктів харчування. Тому спеціалістами різних галузей харчової промисловості проводиться активна робота з пошуку методів збагачення білком традиційних харчових продуктів. Головне завдання, яке має бути при цьому вирішене, це досягнення максимальної відповідності амінокислотних складових фізіологічними потребами організму.

Відомим методом оцінки повноцінності білка за амінокислотним складом є розрахунок амінокислотного SKOPУ. Методика визначення SKOPУ передбачає зіставлення амінокислотного складу білка досліджуваного продукту та еталонного білка, та визначення лімітувальної амінокислоти, ступеня утилізації інших незамінних амінокислот та біологічної цінності. Заведено вважати що біологічна цінність білка визначається лімітувальною амінокислотою, та їх кількістю.

Правильний вибір еталонного білка має значення для оцінки харчових раціонів і визначення білкової повноцінності нових продуктів. Тому формула еталонного білка переглядалася декілька разів. У квітні 2011 року було скликано останні на сьогодні Консультативні збори експертів ФАО, присвячені темі оцінки якості білка в харчуванні людини, де було переглянуто формулу еталонного білка. Використання вдосконаленої формули еталонного білка та сучасних методик розрахунку біологічної цінності забезпечать оптимізацію хімічного складу вже чинних виробів та розробку нових продуктів, хімічний склад яких краще відповідатиме фізіологічним потребам споживачів.

В таблиці 1 наведено інформацію, що до змін формули еталонного білка протягом 1957 – 2011 рр. згідно з рекомендаціями ФАО/ВООЗ. Також треба відмітити, що більшість дослідників усе ще користуються даними затвердженими ФАО/ВООЗ 1971 р. Ми провели порівняння розрахунку деяких показників за якими зазвичай

XXI Всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань сучасної хімії, Дніпро, 22-25 травня 2023 р.

характеризують повноцінність білка для білкового продукту використовуючи формули еталонного білка 1971 та 2011 року.

Таблиця 1

Формули еталонного білка згідно з рекомендаціями ФАО/ВООЗ

Амінокислота	Пропонований вміст, мг/1 г білка				
	1957	1971	1989	2002	2011
Valine	42	50	35	40	40
Гістидин	–	–	19	16	16
Isoleucine	42	40	28	31	30
Leucine	48	70	66	61	61
Lysine	42	55	58	48	48
Cystine+ Methionine	42	35	25	24	23
Threonine	28	40	34	25	25
Tryptophan	14	10	11	6,6	6,6
Tyrosine+ Phenylalanine	56	60	63	41	41

Таблиця 2

Оцінка якості білків білкового продукту за амінокислотним СКОРом розрахованих за різною формулою еталонного білка

Амінокислота	Вміст амінокислоти у продукті г/100 г	1971			2011		
		СКОР, %	U	ΔPAC	СКОР, %	U	ΔPAC
Valine	6,12	122	0,86	17	153*	1	0
Isoleucine	5,46	137	0,77	32	182	0,84	29
Leucine	10,92	156	0,67	51	179	0,86	26
Lysine	12,24	223	0,47	118	255	0,60	102
Threonine	7,15	179	0,59	74	286	0,55	133
Tyrosine+ Phenylalanine	10,66	178	0,59	73	260	0,59	107
Cystine+ Methionine	3,69	105*	1	0	160	0,96	7
ΔPAC, сума				365			404
Коефіцієнт розбалансованості амінокислотного складу KPAC				52			58
Біологічна цінності				48			42
Коефіцієнт утилітарності амінокислотного складу, U				0,71			0,77
Лімітувальна амінокислота				відсутня			відсутня

Розрахунки також показали, що використовуючи нову формулу еталонного білка збільшуються значення СКОРу та коефіцієнт утилітарності, але збільшується значення розбіжності амінокислотного СКОРу та коефіцієнт розбалансованості амінокислотного складу.

Біологічна цінність розраховується як $БЦ = 100 - КРАС$, то зменшується параметр біологічна цінність, що пояснює чому більшість розрахунків біологічної цінності білка в харчових продуктах продовжують рахувати за формулою еталона 1971 року.

Література

1. Protein quality evaluation: report of the Joint FAO/WHO Expert Consultation. Rome: FAO, 1991. 66 p. Режим доступу: http://apps.who.int/iris/bitstream/10665/38133/1/9251030979_eng.pdf
2. Protein and amino acid requirements in human nutrition : report of a Joint FAO/WHO/UNU Expert Consultation (WHO technical report series ; no. 935). Geneva: WHO, 2007. 256 p. Режим доступу: http://apps.who.int/iris/bitstream/10665/43411/1/WHO_TRS_935_eng.pdf
3. Dietary protein quality evaluation in human nutrition: Report of an FAO Expert Consultation. Rome: FAO, 2013. 66 p. Режим доступу: <http://www.fao.org/3/a-i3124e.pdf>

УДОСКОНАЛЕННЯ ТЕХНОЛОГІЇ ФОНДАНУ З ВИКОРИСТАННЯМ БЕЗГЛЮТЕНОВОГО БОРОШНА

Мацук Ю. А., Оскаленко А. Є.

*Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара,
м. Дніпро, проспект Гагаріна, 72*

Умови життя сучасного українця – загроза життю та здоров'ю, психологічні та нервові навантаження, недостатня фізична активність, зниження якості харчових продуктів та збільшення їх вартості призводять до погіршення харчового статусу населення, послаблення імунітету, збільшення кількості хронічних неінфекційних захворювань, зменшення тривалості життя [1].

Здавна зв'язок пшениці і людини є непорушним і життєво важливим. Для українців він особливо цінний і викарбуваний в генетичному коді. Проте, для людей, що хворіють целиакією її вживання є небезпечним. За останні 30...40 років уявлення про розповсюдженість цього захворювання значно змінилися.

Не так давно целиакія вважалася винятковою хворобою, що зустрічалася здебільшого у дітей, що пояснюється порівняно недавнім використанням новітніх методів її діагностики. За даними всесвітньої організації гастроентерології (ВОГ) розповсюдженість целиакії у всьому світі дорівнює 1:100-1:300 (в залежності від території), тобто 1 % населення планети страждає від целиакії. Разом з цим варто відзначити, що істотно збільшився вік хворих на целиакію, переважно – це жінки та чоловіки 35...50 років. Співвідношення захворюваності серед жінок і чоловіків дорівнює 2:1.

За результатами досліджень Українського товариства целиакії – в Україні налічується близько 1800 хворих із підтвердженим діагнозом глютенної ентеропатії. Лікування целиакії можливе виключно через суворе дієтичне харчування з виключенням навіть мікродоз глютену [2...4].

Загально відомо, що целиакія – це генетично спричинене захворювання тонкого кишківника, що характеризується дефіцитом ферментів, придатних розщеплювати білок злакових культур (глютен), та розвитком характерних змін слизової тонкої кишки. У медичній літературі використовується достатньо велика кількість термінів, якою позначається ця патологія: глютенна ентеропатія, кишковий інфантилізм, нетропічна спру та ін.

У людей, хворих на целиакію існує стійка неперетравлюваність глютену, тому вживання продуктів, в яких він міститься, спричиняє розвиток виразної клінічної картини, де головними проявами є піниста діарея, здуття живота, втрата ваги, біль у животі. Перші симптоми хвороби проявляються, здебільшого, ще в дитинстві, однак деякі форми виражаються у дорослому віці (після 40 років). Слід відзначити, що дорослі переносять захворювання, зазвичай, легше, ніж діти [3].

Безглютенова дієта дає можливість отримати позитивний результат лікування.

На даний момент в Україні потреби населення в безглютенових продуктах забезпечуються за рахунок імпортової продукції. До рецептур виробів вводять сировину, що не містить глютену: безглютенові види борошна, ячні й молочні продукти, продукти переробки сої. Поряд з готовою продукцією, в Україну постачаються суміші для домашнього приготування хлібобулочних, кондитерських і макаронних виробів

Наразі важливими проблемами, що стоять перед кондитерською промисловістю є економія дорогих і дефіцитних видів сировини, розширення і вдосконалення асортименту. Необхідно запропонувати споживачеві нові якісні вироби на основі використання нетрадиційних видів сировини з високими споживчими характеристиками і невисокою вартістю. В даний час актуальною є розробка продуктів спеціалізованого призначення, а саме для харчування людей, які страждають на целиакію.

Виходячи з вищевикладеного, удосконалення технології безглютенових борошняних кондитерських виробів з використанням безглютенових видів борошна, є актуальною проблемою та підпадає під державну політику України щодо забезпечення здорового харчування населення.

На думку провідних вчених В. Кулініч, Н. Лобачова, А. Гавриш, О. Шаніна, В. Доценко, В. Дробот, А. Грищенко, Н. Лазаренка успішним вирішенням даної проблеми є створення виробів на основі безглютенового борошна.

Метою роботи є удосконалення технології фондану (Fondant au chocolat) за рахунок використання безглютенових видів борошна. На основі теоретичних та експериментальних досліджень доведено ефективність використання безглютенового борошна (рисового, кукурудзяного та гречаного) для підвищення якості безглютенової продукції та науково обґрунтовано його позитивний вплив на органолептичні властивості та фізико-хімічні показники готових виробів.

Здійснювалася 100 % заміна пшеничного борошна в рецептурі фондану, відомого французького десерту, на безглютенові види борошна: гречане, рисове та кукурудзяне.

В таблиці 1 наведена рецептура розробленого безглютенового фондану.

Таблиця 1 - Рецептура шоколадного фондану
(суміш безглютенового борошна)

Найменування сировини	Маса сировини				Нормативний документ, що регламентує вимоги до якості
	На 10 шт, г		На 100 шт, г		
	Брутто	Нетто	Брутто	Нетто	
Шоколад	250	250	2500	2500	ДСТУ 3924:2014
Борошно кукурудзяне	43,29	43,29	432,9	432,9	ДСТУ 2629-94
Борошно гречане	43,29	43,29	432,9	432,9	ДСТУ 7702:2015
Борошно рисове	43,29	43,29	432,9	432,9	ТУ15.6-00952737- 006-2002
Масло вершкове	250	250	2500	2500	ДСТУ 4399:2005
Меланж	200	200	2000	2000	ДСТУ 8719:2017
Цукор ванільний	20	20	200	200	ДСТУ 1009:2005
Цукор	190	190	1900	1900	ДСТУ 4327:2006
Какао порошок	75	75	750	750	ДСТУ 4391:2017
Вихід н/ф	-	1115	-	11150	
Вихід	-	932	-	9320	

На рис. 1. представлений розроблений безглютеновий фондан.



Рис. 1 – Безглютеновий фондан

За результатами багаторазових відпрацювань було встановлено, що заміна пшеничного борошна на безглютенове дає можливість отримати безглютенові фондани з необхідними регламентованими показниками.

Проведена дегустаційна оцінка підтвердила, що фондан з використанням безглютенових видів борошна, виготовлений за удосконаленою технологією характеризуються покращеними смаковими властивостями та може бути рекомендований для промислового виробництва нових десертів. Крім того підібрана композиція безглютенового борошна дозволяє покращити структурно-механічні та функціонально-технологічні показники фонданів.

Підсумовуючи все вище зазначене можна зробити висновок, що на вітчизняному просторі наукових досліджень, присвячених технології безглютенових фонданів недостатньо. Саме тому підбір раціонального співвідношення інгредієнтів для даного десерту й розробка технологічної документації є своєчасним напрямком досліджень.

Список літератури

1. Мацук Ю. А., Колпікова Є. О., Іщенко Н. В. Обґрунтування технології безглютенових кексів із додаванням насіння чіа *Науковий вісник PUET: Technical Sciences*. 2020. №. 1 (91).
2. World Health Organization. Europe. Nutrition, Physical Activity and Obesity. Ukraine. URL: https://www.euro.who.int/__data/assets/pdf_file/0019/243334/Ukraine-WHO-Country-Profile.pdf (дата звернення: 03.09.2022).
3. Coeliac disease – Treatment (Лікування целиакії) URL: <https://www.nhs.uk/conditions/coeliac-disease/treatment/> (дата звернення 12.04.2023).
4. Целиакія URL: <https://into-sana.ua/enc/celiakiya/> (дата звернення 12.04.2023).

ВИВЧЕННЯ ПРЕСОВОГО МЕТОДУ ВИЛУЧЕННЯ ОЛІЇ З СОНЯШНИКОВОГО НАСІННЯ

Лазаревич Я.Д.

*Національний університет харчових технологій
вул. Володимирська, 68, м. Київ, Україна*

Найбільш поширеною рослинною олією в Україні є соняшникова завдяки попиту на цей продукт на зовнішніх ринках. Із кожним роком посівні площі соняшнику в Україні збільшуються, як і потужності для його переробки. Це, своєю чергою, зробило ринок соняшнику і продуктів його переробки одним із ринків, що стрімко розвивається в Україні.

Удосконаленню процесів пресування олійного насіння приділяється велика увага, оскільки саме ця стадія досить енергоємна, а отже, значною мірою визначає вартість готового продукту і, крім того, істотно впливає на якісні показники товарної продукції.

Більшість виробників олії, для забезпечення процесу пресування, віддає перевагу прес-екструдерам, використання яких дозволяє суттєво спростити технологію переробки насіння олійних культур за рахунок поєднання в них операцій подрібнення олійного матеріалу і його теплової обробки.

Роботу виконано за аналітичними даними виробничої лабораторії ООО «ОІЛПРОДАКШН», м. Кропивницький. Засміченість насіння соняшнику визначено за вмістом олійних і сміттєвих домішок, олійність насіння і макухи методом Сокслета.

Виробництво рослинних олій незалежно від способу починається з підготовчого етапу, який включає наступні стадії: очищення олійної сировини від домішок; кондиціонування насіння по вологості; обвалення насіння з отриманням рушанки; поділ рушанки сепаруванням; подрібнення ядра. Основні стадії виробництва пресових олій: вологотеплова обробка (смаження) з отриманням мезги; форпресування з отриманням пресової олії; відстоювання та фільтрування олії.

За технологією переробки насіння методом двократного пресування тип ліній може бути представлено наступним поєднанням пресів: FL+FS або FS+FS. Для технологій пресування з екструзією лінія включає два преса і екструдер і має наступне позначення: FL+FE+FL або FS+FE+FS. В табл. 1. наведено склад технологічних ліній, реалізованих на базі пресів і екструдерів із зазначенням діапазону годинної, добової і річної потужностей.

При роботі шнекових пресів принцип віджимання олії полягає в тому, що шнековий вал транспортує олійний матеріал всередині зєрного циліндра, який набраний з пластин з малими зазорами між ними. Геометрія

XXI Всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань сучасної хімії, Дніпро, 22-25 травня 2023 р.

каналу, утвореного набором шнекових витків, забезпечує зменшення вільного обсягу витків по ходу руху матеріалу від завантажувальної воронки до вихідної щілини преса і тим самим стискає матеріал а пресовій камері. Відпресована олія відводиться із зони пресування через щілини між пластинами, а макуха проходить через кільцевий зазор на виході зєрнього циліндра.

Таблиця 1. Склад пресових ліній

Склад лінії	Потужність лінії		
	погодинна (т/год)	добова (т/добу)	річна (т/рік)
FL 200+FS 1010	1 - 7	24 - 168	7920 - 55440
FS 1010+FS 1010	1,8 - 12,6	43,2 - 300	14256 - 174240
FS 4010+nFS 1010	5,5 - 22,0	132 - 528	43560 - 174240

На вихід олії впливає ряд факторів, які було вивчено в роботі пресового відділення олієдобувного цеху ООО «ОІЛПРОДАКШН», м. Кропивницький.

Таблиця 2. Статистичні дані роботи пресового відділення

Дата	Засміченість насіння	Олійність насіння	Залишкова олійність макухи
01.10.2022	2,9	49,0	10,9
02.10.2022	3,2	49,1	10,4
03.10.2022	3,2	49,1	10,6
04.10.2022	2,3	49,1	10,5
07.10.2022	2,4	49,2	10,5
08.10.2022	2,9	49,2	10,9
09.10.2022	2,9	48,9	10,3
10.10.2022	2,5	49,1	10,4
11.10.2022	2,9	49,1	10,9
12.10.2022	2,8	49,3	9,3
13.10.2022	3,2	49,1	8,9
14.10.2022	3,0	49,8	9,9
15.10.2022	2,8	50,4	10,0
Середнє	2,65	49,99	10,49

Згідно даних виробничої лабораторії, що наведені в таблиці 2, при роботі пресового відділення олійність насіння практично не впливає на вихід олії. Це можна контролювати за залишком олії в макусі після віджиму пресом.

Параметри роботи пресу регулюють залежно від початкової олійності мезги, яка надходить на пресування, тиском, що створюється в зєрній камері (рис.).

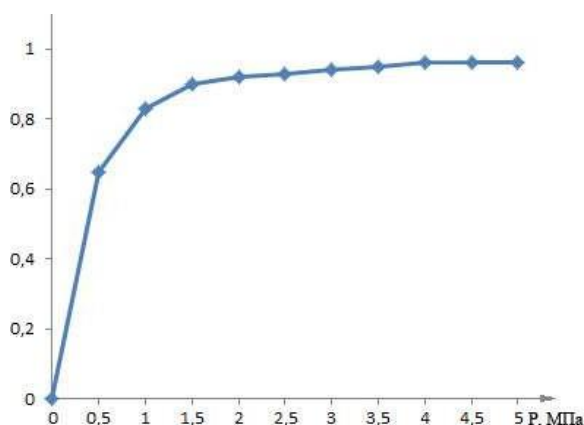


Рисунок. Графік залежності відтоку олії від тиску в зоні віджиму

Для виведення розрахункових співвідношень відтоку олії від параметрів роботи пресу розглядали розгорнутий на площині канал шнека в зоні віджиму. За відомої продуктивності преса по олії дозволяє ідентифікувати величину проникності мезги.

Таблиця 3. Результати обчислень для різних параметрів процесу пресування

Тиск на виході зони віджиму, МПа	Тиск на вході зони віджиму, МПа	Рівень віджиму, МПа/м	Проникність мезги, м ²	Ступінь віджиму олії
5,0	6,0	1,131	$6,97 \cdot 10^{-14}$	0,855
5,0	7,0	2,262	$6,48 \cdot 10^{-14}$	0,853
3,0	5,0	2,262	$9,99 \cdot 10^{-14}$	0,849
3,0	7,0	4,525	$8,22 \cdot 10^{-14}$	0,845

Як випливає з таблиці 3, проникність мезги зі зростанням тиску в зерній камері падає, що призводить до деякого зменшення ступеня віджиму олії. При однаковому перепаді тиску в зеєрі, але при різних початкових значеннях тиску на вході в камеру фільтрації рівень віджиму також дещо змінюється.

За даними виробничої лабораторії ООО «ОІЛПРОДАКШН», м. Кропивницький, вивчено залежності виходу олії від початкової олійності насіння, засміченості та лушпинності ядар, а також залежність вмісту фосфору в олії від засміченості насіння. Математично змодельовано процеси, що відбуваються в зерній камері шнекового олієпресу. Показано, що проникність мезги зі зростанням тиску в зерній камері падає, що призводить до деякого зменшення ступеня віджиму олії. Отримані результати дозволяють виявити вплив окремих факторів на функціонування шнекових пресів та можуть бути використані при проектуванні і оптимізації їхньої роботи.

**УДОСКОНАЛЕННЯ ТЕХНОЛОГІЇ ВИРОБНИЦТВА СІЧЕНИХ
НАПІВФАБРИКАТІВ З ІНДИЧОГО ФАРШУ З ДОДАВАННЯМ ВАРЕНОГО
ГАРБУЗОВОГО ПЮРЕ ДЛЯ ДИТЯЧОГО ХАРЧУВАННЯ**

Мацук Ю. А., Травнікова В.В.

*Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара,
м. Дніпро, проспект Гагаріна, 72*

Загально відомо, що харчування має велике значення для здоров'я дитини. Діти потребують різноманітної та балансованої дієти, щоб забезпечити належний розвиток інтелектуальних та фізичних здібностей. Важливо, щоб дитяча їжа була не тільки корисною, але й смачною та привабливою для малюка. Виробництво січених напівфабрикатів з індичого фаршу з додаванням вареного гарбузового пюре є однією з можливих інноваційних технологій для створення смачних та корисних страв для дітей. У даній роботі розглянуті переваги та технічні аспекти виробництва напівфабрикатів для дитячого харчування. Слід зазначити, що гарбузове пюре - це джерело вітамінів та мінералів, необхідних для здорового розвитку дитини. Пюре містить більшість вітамінів групи В, вітамін С та каротиноїди, такі як бета-каротин, який перетворюється в організмі на вітамін А. Крім того, гарбузове пюре містить калій, магній та цинк, які є важливими для правильного розвитку серцево-судинної та нервової систем.

Додавання гарбузового пюре до індичого фаршу допомагає підвищити харчову цінність продукту та робить його більш корисним для дітей. Такий продукт містить менше жирів та характеризується зниженою калорійністю, що може допомогти у підтримці нормальної маси тіла дитини. Крім того, гарбузове пюре має ніжну текстуру та приємний смак, що робить його привабливим для дітей, які зазвичай дещо вибагливі у виборі їжі. Виробництво січених напівфабрикатів з індичого фаршу та гарбузового пюре є технологічно складним процесом, що вимагає досить високої кваліфікації персоналу та дотримання суворих вимог щодо якості та безпеки продукту.

Основні етапи виробництва січених напівфабрикатів з індичого фаршу та гарбузового пюре включають наступні етапи. Підготовка індичого фаршу: свіжі індичі грудки змішуються з різними спеціями та іншими інгредієнтами, щоб створити смакову основу для напівфабрикатів. Приготування гарбузового пюре: гарбузи обробляються та варяться до м'якості, після чого перетираються на пюре. Змішування індичого фаршу та

гарбузового пюре: гарбузове пюре додається до індичого фаршу, щоб створити однорідну консистенцію. Формування січених напівфабрикатів: отримана маса формується заданої форми та розміру. Обробка та пакування: напівфабрикати піддаються термічній обробці та пакуються відповідно до встановлених стандартів якості та безпеки. Січені напівфабрикати з індичого фаршу та гарбузового пюре містять велику кількість білків та вітамінів, що робить їх корисними для здоров'я дітей. Індичий фарш містить білки та залізо, що необхідні для росту та розвитку організму дитини, а гарбузи багаті вітамінами А, С та Е, а також каротином, які покращують зір та стан шкіри. Харчова цінність розроблених напівфабрикатів на 100 г продукту: білки - 12 г, жири - 5 г, вуглеводи - 9 г, калорійність - 108 ккал. Для дітей, які є вибагливими у виборі їжі, січені напівфабрикати можуть бути корисним рішенням для забезпечення правильного харчування та урізноманітнення раціону. Удосконалення технології виробництва січених напівфабрикатів з індичого фаршу з додаванням вареного гарбузового пюре для дитячого харчування є важливим кроком у поліпшенні якості та безпеки продукту, а також забезпечення корисності для здоров'я дітей. Цей продукт має бути відповідно позиціонований на ринку та відповідати вимогам стандартів якості та безпеки, щоб забезпечити довіру споживачів. Також важливим є врахування специфіки дітей різного віку та харчових потреб у розробці та позиціонуванні даного продукту. Для найменших дітей можуть бути важливими аспекти, такі як текстура та розмір порцій, а для старших дітей - склад та смакові якості.

Дослідження ринку та вивчення потреб споживачів можуть допомогти розробити оптимальний склад та упаковку для даного продукту. Також можна розглянути можливість додавання інших корисних інгредієнтів, таких як овочі та зелень, щоб забезпечити більшу різноманітність. Підсумовуючи все вище зазначене можна зробити висновок, що удосконалення технології січених напівфабрикатів з індичого фаршу з додаванням вареного гарбузового пюре для дитячого харчування є важливим кроком у поліпшенні якості та безпеки продукту та може бути корисним для забезпечення правильного харчування та введення різноманітності у харчування дітей. Важливо враховувати специфіку дітей різного віку та потреби споживачів у розробці та позиціонуванні даного продукту.

XXI Всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань сучасної хімії, Дніпро, 22-25 травня 2023 р.

Агаян А.Р. 82	Косіцина О. С. 55	Пешук Є.С.79
Аксіментьєва О.І. 73	Костолович М.І.	Пирожок А.А. 52
	Крилкіна А.І. 28	Плясовська К. А. 76
Балич І. 12,14	Куліш Б.І. 62	Поджарський М.А. 49
Бондаренко М. 31	Курасова Ю.Д. 66	Полонський В.А. 66,70
Братичак М. 52	Кут Д.Ж. 41	Присяжна О. 14
Бурячишен Н. 12,14	Кут М.М. 41	Пустильник С.В. 70
	Кучай І. М. 76	
Варгалюк В.Ф. 66,70,76	Кучеренко. А.М. 58	Романовська А.О. 16
Вітрук Я. 12		
Вишнікін А. Б. 16,31,38	Лагута О.В. 70	Савчук Н.С. 6
	Лазаревич Я.Д. 92	Салигіна Т.П. 45
Гайда А. 12,14	Лебідь А.І. 55	Сидорова Л.П. 20,25
Головко О. Є. 16	Левицький В.Є. 62	
Гречишкіна М. О.	Лінко Т.А. 20	Тараненко І.В.
Громова Д.С. 25		Токар А.В. 45
	Мартинюк Г.В. 73	Травнікова В.В. 95
Денисенко Т.О. 79	Масюк А.С. 62	
Дралевський М.С. 31	Маторіна К.В. 6,10	Українська Д.Е. 34
Дулєбова Л. 58	Мацук Ю. А. 88, 95	
	Могильна І.О. 9	Хмельникова Л.І. 28
Жданкін А.Є. 31	Моравський В.С. 58	
Жук Л. П. 34	Мосейчук Т. О. 73	Чернушенко О.О. 82,85
Журіда Ю.В. 85		Чернявська О.Ю. 38
	Нестеров А. М. 34, 49	Чопик Н.В. 52
Земке В.М. 52		
	Онисько М.Ю. 41	Шевцова К. Р.
Кечур Д.І. 62	Оскаленко А. Є. 88	
Киричок О. 12,14	Осокін Є.С. 66	Яцков М. В. 73
Клімова О. 14	Островська Г.О.	
Ковальчук М. О. 73		
Кондратенко Л.С. 10	Пелих С. 12,14	