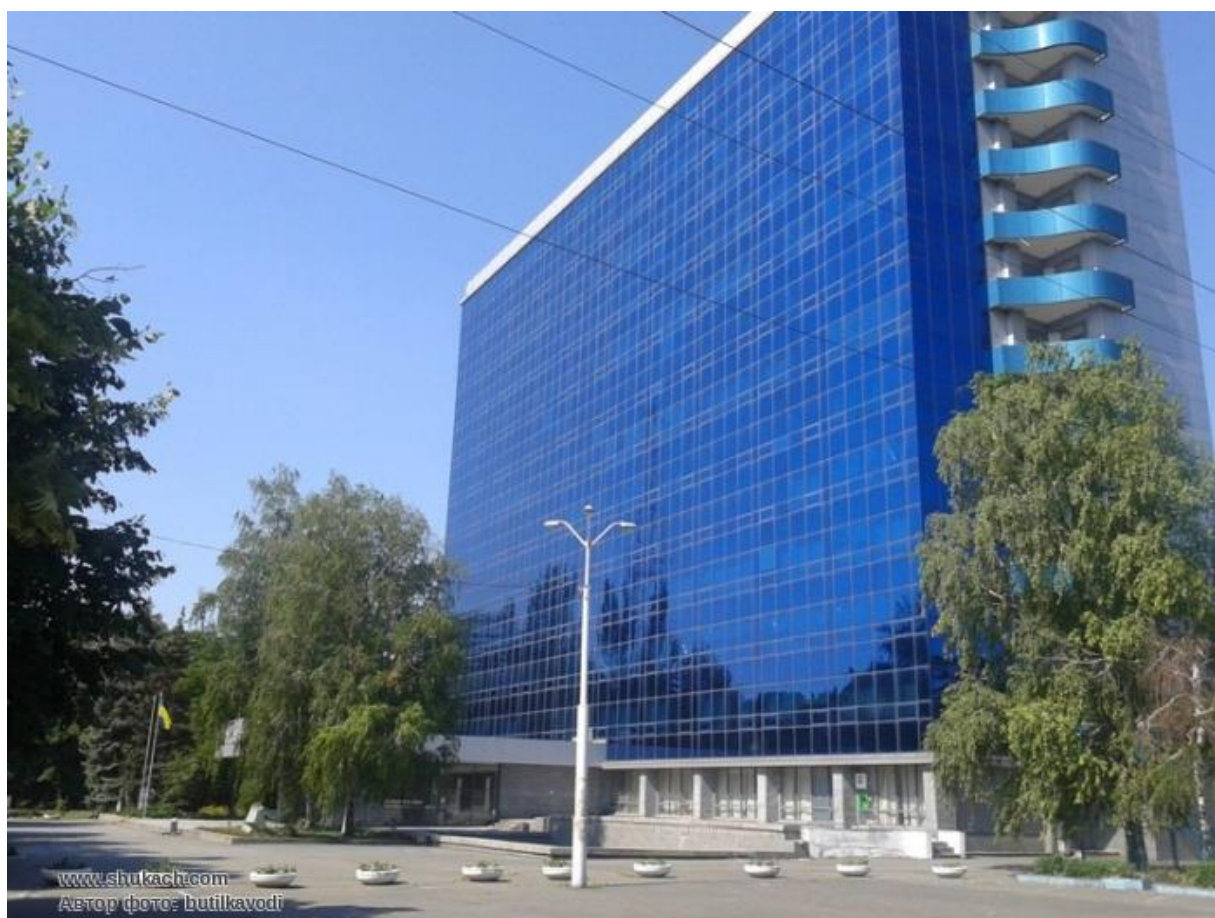


*XXIII Всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань сучасної хімії, Дніпро, 19-22 травня 2025 р.*

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

**Інститут органічної хімії  
НАН України**

***XXIII ВСЕУКРАЇНСЬКА КОНФЕРЕНЦІЯ***  
молодих вчених та студентів  
з актуальних питань сучасної хімії



**МАТЕРІАЛИ КОНФЕРЕНЦІЇ**

Дніпро  
19-22 травня 2025 р.

*XXIII Всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань сучасної хімії, Дніпро, 19-22 травня 2025 р.*

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

**Інститут органічної хімії  
НАН України**

***XXIII ВСЕУКРАЇНСЬКА КОНФЕРЕНЦІЯ***  
молодих вчених та студентів  
з актуальних питань сучасної хімії



Дніпро  
19-22 травня 2025 р.

**XXIII Всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань сучасної хімії, Дніпро, 19-22 травня 2025 р.**

**ПРОГРАМНИЙ ОРГАНІЗАЦІЙНИЙ КОМІТЕТ**

Голова - **Коптєва Світлана Дмитрівна**, декан хімічного факультета, канд. хім. наук, доцент

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

**Оковитий Сергій Іванович**, ректор ДНУ, д-р хім. наук, професор, чл.-кор. НАНУ

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

**Варгалюк Віктор Федорович**, д-р. хім. наук, професор, Заслужений діяч науки і техніки України

**Вишнікін Андрій Борисович**, д-р хім. наук, професор, академік АН вищої школи України

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

**Косіцина Олена Сергіївна**, зав. каф. аналітичної хімії та хімічної технології ДНУ, канд. хім. наук, доцент

**Фарісєєв Андрій Геннадійович**, зав. каф. харчових технологій ДНУ, канд. техн. наук, доцент

**Кондратюк Наталія Вячеславівна**, заступник декана з наукової роботи, канд. техн. наук, доцент

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

**Пальчиков Віталій Олександрович**, директор НДІ хімії та геології ДНУ, д-р хім. наук, професор

**Коваленко Сергій Іванович**, провідний науковий співробітник НДІ хімії та геології ДНУ, д-р фарм. наук, професор

**АДРЕСА ОРГКОМІТЕТУ:**

Хімічний факультет (16 корпус),

Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара

вул. Ніла Армстронга, 22

Дніпро, 49000, Україна

*XXIII Всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань сучасної хімії, Дніпро, 19-22 травня 2025 р.*

**УДК 54(063)**

**ББК 24я431**

**Т 67**

**ISBN**

Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара  
Інститут органічної хімії НАН України

**Голова оргкомітету**

*Коптєва Світлана Дмитрівна*, декан хімічного факультета, канд. хім. наук, доцент

**Т67** «XXII Всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань сучасної хімії» Дніпро, 2025. - 112 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**

## **ВЛАСТИВОСТІ ФЛАВОНОЇДІВ ТА СУЧАСНІ ПРОБЛЕМИ ЇХ ВИЗНАЧЕННЯ**

Бондаренко В.В., Худякова С.М., Кондратюк Н.В.

Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара, 49045,  
м. Дніпро пр. Науки,72

Флавоноїди – це великий клас поліфенольних сполук, більшість з яких існує в різних модифікованих формах, в основному класифікованих як флаванони, флавори, ізофлавори, флавоноли та антоціани. При цьому глікозиди є найпоширенішою їх модифікованою формою. Це велика група рослинних сполук, які відіграють важливу роль у живих організмах, включаючи людину. Кожен із зазначених флавоноїдів широко поширений у природі. Вони зазвичай містяться в овочах, фруктах, крупах, чаї та входять до складу рослин, які за рахунок цього набувають харчової цінності та лікувальних властивостей. Флавоноїди, які представлені широким спектром різних речовин, мають схожу будову, але відрізняються функціями та дією на організм людини. Серед природних антиоксидантів, таких як вітамін А (ретинол), С (аскорбінова кислота) і Е (токоферол) флавоноїди особливо цікаві як найбільш біологічно активні та поширені дієтичні антиоксиданти, присутні у значних кількостях у харчових продуктах та напоях. Флавоноїди відіграють важливу роль у боротьбі з окислювальним стресом та підтримці його рівня нижче критичної точки в організмі. Останніми роками флавоноїди продемонстрували великий потенціал, щоб стати успішним кандидатом на лікування. Людина не може самостійно синтезувати флавоноїди і отримує їх лише з їжі. Завдяки складній та різноманітній біологічній активності флавоноїдів, вони широко використовуються у фармацевтичній та харчовій промисловості, при цьому залишаються в центрі досліджень різноманітних наук. Нещодавно

*XXIII Всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань сучасної хімії, Дніпро, 19-22 травня 2025 р.*

дослідники виявили, що, наприклад, рутин має потенційну роль як протиракова, протидіабетична, протимікробна, протигрибкова, антиоксидантна та протиалергічна сполука, крім цього як харчова добавка та консервант тощо.

Визначення цільових аналітів, флавоноїдів у тому числі, на рівнях слідової концентрації або в складних матрицях часто вимагає попереднього екстракційного концентрування або етапів очищення. Через широкий діапазон структурних властивостей різних поліфенольних сполук їх вилучення завжди було проблемою для вчених-дослідників. Для відповідних сполук використовуються різні методи екстракції. Традиційні органічні розчинники, включаючи метанол, етанол, ацетон та етилацетат, зазвичай використовуються для виділення біоактивних сполук з рослин. Однак, використання зазначених розчинників викликає занепокоєння щодо стійкості через їх токсичність, займистість та обмежену здатність до біологічного розкладання. Крім того, переробка цих розчинників із залишків видобутку є важкою, що може призвести до негативного впливу на навколишнє середовище.

Концепція «зеленої» аналітичної хімії передбачає розробку екологічних аналітичних методик, заохочує використання прямого аналізу, щоб уникнути будь-якої обробки зразків, яка передбачає споживання токсичних органічних розчинників або реагентів та утворення при цьому токсичних відходів. Слід зазначити, що вибір розчинника є критичним фактором у цих процесах, оскільки він значно впливає на вихід та якість екстрагованих флавоноїдів.

У літературі проведено екологічну оцінку методів екстракції, альтернативних тим, які зараз широко використовуються для екстракції аналітів з твердих, рідких та газоподібних зразків. При цьому систематизовано та запропоновано різні альтернативи для зменшення

ризиків методів видобутку для навколишнього середовища, безпеки операторів та основні аналітичні характеристики методів. У цьому аспекті увагу дослідників привертають глибокі евтектичні розчинники як ефективна та стійка заміна традиційного органічного розчинника. Вони є економічно ефективними, екологічно чистими, легкими у приготуванні та зручними для зберігання, а також демонструють такі властивості, як низька токсичність, здатність до біологічного розкладання та тривалий термін зберігання.

Більшість поліфенольних сполук знаходяться в кислотній формі і залежно від рН розчину існують у нейтральній або іонній формах. Поверхнево-активні речовини (ПАР) належать до класу сполук, відомих як амфіфіли – молекули, що мають як гідрофобний, так і гідрофільний компонент. Описано екстракцію фенольних сполук розчинами ПАР різної природи. При цьому досліджували утворення гідрофільних фенольних сполук, що легко екстрагуються у водний міцелярний розчин.

Отже, існує сильний поштовх до розробки стійких та екологічно чистих розчинників та екстрагентів. На даний момент немає рекомендованого спеціального або відповідного екстракційного розчинника для оптимального вилучення загального вмісту флавоноїдів (ЗВФ) з вихідної матриці зразка через різноманітні хімічні структури поліфенолів, починаючи від простих та вільних до кон'югованих та полімеризованих форм (ліпофільних), які можуть, як наслідок, вплинути на їх розчинність.

Традиційні методи визначення ЗВФ у природних матеріалах, ліках та харчових продуктах базуються на хімічній екстракції та поєднуються з різними аналітичними методами, такими як високоефективна рідинна хроматографія, газова хроматографія та ультрафіолетова спектрометрія. Ці методи є точними, деякі з них використовуються як еталонні методи

виявлення ЗВФ. Хроматографічні методи є чутливими та специфічними, але є деякі очевидні недоліки, такі як складна попередня обробка зразків, тривалий час визначення та висока вартість, що значною мірою обмежують їх широке застосування для швидкого скринінгового виявлення. Взагалі інструментальний аналіз обмежений тим, що потрібні дорогі прилади та висококваліфіковані спеціалісти.

Нині застосування нових методів без органічних токсичних і дорогих розчинників має великий потенціал у різноманітних дослідженнях. Мініатюризація, автоматизація та інтеграція етапів екстракції разом із вимірювальними є основними інструментами для екологізації екстракції. Розробка нових сорбційних методик без використання дороговартісних токсичних органічних розчинників або мікро екстракційних рідинно-рідинних методик кількісного вилучення та експресного детектування аналіту дозволяє вирішити *проблеми етичного використання відповідних методів та методик при визначенні аналітів різної природи, у тому числі флавоноїдів.*

У цьому аспекті визначення флавоноїдів в екстрактах, отриманих з рослинної сировини, контроль якості відповідних лікарських препаратів, харчових добавок, продуктів харчування, що містять флавоноїди, та експресний контроль їх вмісту з використанням простих та доступних методів, зокрема спектрофотометрії, у тому числі твердофазної є актуальним аналітичним завданням для визначення суми флавоноїдів та їх окремих представників у досліджуваних об'єктах.

**АНАЛІТИЧНИЙ КОНТРОЛЬ ВМІСТУ ДЕЯКИХ ІОНІВ МЕТАЛІВ У ХАРЧОВИХ ПРОДУКТАХ ТА ОБ'ЄКТАХ ДОВКІЛЛЯ**

*Корольчук Н.М., Сидорова Л. П.*

*Дніпропетровський національний університет імені Олеся Гончара  
49010, м. Дніпро, просп. Науки, 72*

Важкі метали є небіорозкладними забруднювачами, що здатні накопичуватись у ґрунті, воді, живих організмах і через харчові продукти потрапляти в організм людини. В умовах повномасштабної війни в Україні екологічна ситуація суттєво ускладнилася: внаслідок вибухів, пожеж, руйнування техніки й об'єктів інфраструктури у довкілля потрапляють токсичні метали — свинець (Pb), кадмій (Cd), мідь (Cu), цинк (Zn), нікель (Ni), сурма (Sb), хром (Cr). Ці елементи виявляють у воді, ґрунтах, рослинах, продуктах харчування. З огляду на небезпеку для здоров'я населення, зростає потреба у точному, швидкому та доступному контролі вмісту металів у харчових продуктах та об'єктах довкілля.

Сьогодні існує низка методів, які дозволяють виявляти іони важких металів у продуктах харчування, воді та ґрунтах. Кожен з них має свої переваги та обмеження, що обумовлює їхнє застосування залежно від мети дослідження.

- 1) ICP-MS (індуктивно-зв'язана плазмова мас-спектрометрія). Це високочутливий інструментальний метод, здатний виявляти наднизькі концентрації елементів (до 0.0001 мг/л). Однією з головних переваг ICP-MS є можливість одночасного визначення десятків металів у короткій проміжок часу (2–5 хвилин на зразок). Використовується для контролю води, молока, риби, овочів, м'яса та інших продуктів після мінералізації. Основними недоліками є висока вартість обладнання та обслуговування, складність роботи, а також потреба в чистих умовах та спеціалістах.
- 2) AAS (атомно-абсорбційна спектроскопія). Цей метод заснований на поглинанні світла атомами металів і широко використовується для визначення Pb, Cd, Zn, Cu в харчових продуктах. Працює як у полум'яному (FAAS), так і в графітному (GFAAS) режимі. Має достатню чутливість (до 0.001 мг/л), добре підходить для рутинного аналізу окремих елементів. Недоліки: одно-елементність (необхідність вимірювати кожен елемент окремо), можливі хімічні інтерференції, потреба в попередній підготовці зразка (мінералізації).
- 3) Фотометричні (колориметричні) методи. Ці методи передбачають утворення забарвлених комплексів між іонами металів і реагентами. Вони є простими у виконанні, економічними та доступними. Особливо корисні для попереднього аналізу у польових умовах або при обмежених ресурсах. Застосовуються для визначення Cu, Fe, Ni, Co у воді, соках, консервах, продуктах дитячого харчування. Основні недоліки: нижча точність і чутливість (межі виявлення зазвичай 0.01–0.1 мг/л).
1. Біосенсори. Інноваційна група методів, що використовують живі клітини, ферменти, ДНК-аптамери чи білки для специфічного зв'язування з іонами металів. Забезпечують швидке визначення навіть при низьких концентраціях (до 0.001 мг/л) без складної підготовки проби. Підходять для експрес-аналізу води, молока, фруктів, овочів. Переваги: портативність, швидкість, невисока вартість. Обмеження: чутливість біоелементів до умов середовища, обмежений термін зберігання, як правило, орієнтовані на один метал.

**XXIII Всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань сучасної хімії, Дніпро, 19-22 травня 2025 р.**

Порівняльна таблиця методів

Метод	Чутливість	Об'єкти аналізу	Умови визначення	Час аналізу	Вартість	Обладнання	Складність
ICP-MS (Індуктивно зв'язана плазмова мас-спектрометрія)	~0.0001 мг/л (0.1 мкг/л), надвисока чутливість	Питна вода, ґрунти, овочі, фрукти, молоко, риба (після мінералізації)	Кислий розчин (напр., 2% HNO <sub>3</sub> ); потребує мінералізації; використовується аргонна плазма; стерильні умови	Швидкий (~2–5 хв/зразок після 30–60 хв мінералізації)	Висока (прилад >100 000 \$, аналіз ~10–20 \$)	ICP-MS, джерело плазми, мас-аналізатор, система колізій	Висока (дороге обладнання, складність у підготовці проб і обслуговуванні, потреба в фахівцях)
AAS (Атомно-абсорбційна спектроскопія)	~0.001–0.01 мг/л (1–10 мкг/л) з графітною піччю; ~0.05–0.1 мг/л з полум'ям	Питна вода, ґрунти, овочі, крупи, м'ясо, молочна продукція	Кислий розчин; полум'я AAS – повітря-ацетилен; GFAAS – мала кількість проби, модифікатори матриці	Середній (~5 хв/елемент; графітна піч – довше)	Середня (прилад ~10 000–20 000 \$, аналіз ~3–5 \$)	AAS: порожнисті катодні лампи, пальник або піч, детектор	Середня (простий у використанні, але одноелементний, потребує газів)
Екстракційно-фотометричні (колориметричні) методи	~0.01–0.1 мг/л (10–100 мкг/л), залежить від реагенту	Вода, ґрунтові витяжки, консерви, соки, овочеві пюре, крупи	Формування кольорових комплексів, контроль рН, екстракція в органічний розчинник, спектрофотометр	Середній (~10–20 хв/зразок)	Низька (~500–1000 \$ обладнання; аналіз ~1 \$)	Спектрофотометр, екстрактор, реагенти	Середня (дешевий, але трудомісткий, менш точний)

**XXIII Всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань сучасної хімії, Дніпро, 19-22 травня 2025 р.**

Біо-сенсори (біологічні сенсори для металів)	0.005–0.05 мг/л (5–50 мкг/л); деякі <0.001 мг/л	Питна вода, молоко, овочі, фрукти (екстракти або розбавлені зразки)	Залежить від типу: нейтральний рН, буфер; можлива інкубація; мінімум реагентів	Від кількох сек. до 30–60 хв	Низька (сенсор ~10–100 \$, тест ~1–2 \$)	Біосенсор: електрохімічний або оптичний з біоелементом	Низька (простий у застосуванні, портативний)
ICP-OES (оптично-емісійна спектроскопія з індуктивно зв'язаною плазмою)	~0.001–0.02 мг/л (1–20 мкг/л)	Питна вода, мінералізати рослин, зерна, бобові, риба, м'ясо	Ацидований розчин, плазма Ar, спектроскопія випромінювання	Швидкий (~2 хв після підготовки)	Висока (~50 000–80 000 \$, аналіз ~5–10 \$)	ICP-OES, спектрометр, плазмовий генератор	Висока (менш складний за ICP-MS, але дорогий)
XRF (рентгенофлуоресцентна спектроскопія)	~0.5–10 мг/л в твердих зразках	Ґрунт, рослинні залишки, коренеплоди, кормові добавки, дитяче харчування (у вигляді порошку)	Суха, рівна поверхня; XRF випромінювання; калібрування стандартами	Дуже швидкий (секунди – 1–2 хв)	Висока (~30 000–60 000 \$, аналіз ~5 \$)	Портативний або стаціонарний XRF-аналізатор	Низька (простий у роботі, не потребує підготовки)
Електрохімічні сенсори	~0.0005–0.01 мг/л (0.5–10 мкг/л)	Питна вода, молоко, фруктові соки, овочеві екстракти, консерви (після фільтрації або мінералізації)	Електроліт, рН ~2–4; попередня депозиція на електрод; можлива дегазація	~3–10 хв	Низька (~1000–5000 \$, аналіз ~1–2 \$)	Потенціостат, електроди (Hg, Bi, Au тощо)	Середня (потрібен досвід, догляд за електродами)

*XXIII Всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань сучасної хімії, Дніпро, 19-22 травня 2025 р.*

Найбільш чутливим та універсальним методом контролю важких металів є ICP-MS, що дозволяє одночасно визначати десятки елементів на ультранизькому рівні концентрацій. Він незамінний для всеохоплюючого аналізу забруднень у харчових продуктах і довкіллі, проте вимагає дорогого обладнання і кваліфікованого персоналу.

Атомно-абсорбційна спектроскопія (AAS) залишається стандартом для кількісного визначення окремих важких металів у багатьох лабораторіях завдяки достатній чутливості, відпрацьованим методикам та відносно нижчій вартості обладнання. Також доцільно застосовувати для контролю конкретних елементів (Pb, Cd, As тощо) у продуктах харчування та воді. Фотометричні методи є простими і швидкими, підходять для польових умов та попереднього скринінгу. В умовах обмеженого доступу до складних приладів (наприклад, у воєнний час, експедиціях) фотометричні тести дозволяють виявити перевищення гранично допустимих концентрацій важких металів і оперативно прийняти рішення. Однак для підтвердження результатів і точного кількісного визначення потрібні інструментальні методи.

Біосенсори – найбільш перспективний напрямок аналітичного контролю металів. Вони забезпечують портативність, високу вибірковість та можливість безперервного моніторингу в режимі реального часу. Вже створені прототипи, здатні швидко (<5 хв) виявляти сліди Pb, Cd, Hg в воді на рівні діючих норм. Біосенсори доцільно впроваджувати для польових еколого-санітарних досліджень, контролю водопостачання, скринінгу сільськогосподарської продукції тощо. Подальші дослідження спрямовані на підвищення стабільності та мультианалізаторних можливостей біосенсорів.

Вибір методики контролю залежить від поставлених завдань, доступного оснащення та необхідної чутливості. Оптимальним є поєднання: фотометричний або біосенсорний експрес-скринінг на місці відбору проб, а у разі виявлення небезпечних рівнів – підтверджувальний лабораторний аналіз методом AAS або ICP-MS. Такий підхід забезпечує ефективний та економічно обґрунтований моніторинг вмісту важких металів у харчових продуктах і довкіллі, що особливо актуально для України в умовах підвищеного техногенного навантаження і воєнних викликів.

Список використаних джерел

2. ДСТУ ISO 11885:2005. Якість води. Визначення 33 елементів методом ICP-OES. – К.: Держспоживстандарт, 2005.
3. ДСТУ 4287:2004. Якість ґрунтів. Визначення вмісту кадмію, свинцю, міді, цинку. – К.: Держспоживстандарт, 2004.
4. ДСанПіН 2.2.4-171-10. Гігієнічні вимоги до питної води. – К.: МОЗ України, 2010.
5. Екологічна оцінка стану ґрунтів в умовах воєнних дій / І. М. Овчаренко, Т. О. Сидоренко // Вісник аграрної науки. – 2023. – №6. – С. 78–85.
6. Забруднення ґрунтів важкими металами у зоні бойових дій // Екологічний журнал. – 2023. – №2. – С. 51–58.
7. Задорожня, А. С. Аналітичний контроль вмісту іонів металів у продуктах харчування. – [PDF-документ].

**ВАЛІДАЦІЯ СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧНОЇ МЕТОДИКИ  
ВИЗНАЧЕННЯ ТИКАГРЕЛОРУ ДЛЯ ПРОВЕДЕННЯ  
ПОРІВНЯЛЬНИХ ДОСЛІДЖЕНЬ СТУПЕНЯ ВИЛУЧЕННЯ ПРИ  
ВИВЧЕННІ ДОСТАВКИ ЛІКАРСЬКОГО ЗАСОБУ ЧЕРЕЗ  
НАЗОГАСТРАЛЬНИЙ ЗОНД *IN VITRO***

Сисенко О.В.<sup>1</sup>, Єгорова А.В.<sup>2</sup>, Скрипинець Ю.В.<sup>2</sup>, Чеботарська І.І.<sup>2</sup>,  
Александрова Д.І.<sup>2</sup>, Кашуцький С.М.<sup>1</sup>

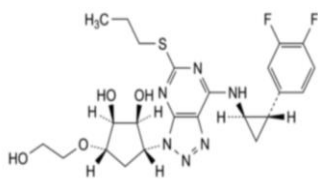
<sup>1</sup> ТДВ «ІНТЕРХІМ»

<sup>2</sup> Фізико-хімічний інститут ім. О. В. Богатського НАН України  
65080, Одеса, Люстдорфська дорога, 86; e-mail: yegorovalla@gmail.com

Підтвердження, що генеричний лікарський засіб є терапевтично еквівалентним до референтного препарату (метод ентерального вводу через зонд), застосовується при державній реєстрації препарату генерику [1].

Для порівняльного випробування *in vitro* потрібно провести дослідження, виконуючи по 12 тестів для досліджуваного та референтного лікарських засобів (далі – ЛЗ), суспендованих в обраному середовищі в початковій точці (0 хв) та протягом максимально допустимого обраного часу змочування, відповідно [2]. Для моніторингу повноти вилучення лікарського препарату після суспендування розтертих таблеток у середовищі (деіонізованій воді) та доставки через назогастральний (далі – НГ) зонд проводять визначення порівняльного ступеня вилучення.

Тикагрелор ((1S,2S,3R,5S)-3-[7-[[[(1R,2S)-2-(3,4-дифторфеніл)циклопропіл]аміно]-5-(пропілсульфаніл)-3Н-[1,2,3]триазоло[4,5-d]піримідин-3-іл]-5-(2-гідроксиетокси)циклопентан-1,2-діол) – належить до



Тикагрелор (ТГ)

хімічного класу циклопентилтриазолопіримідинів та є пероральним, селективним і оборотно зв'язуючим антагоністом рецепторів P2Y12 прямої дії, запобігає АДФ-опосередкованим P2Y12-залежним активації та агрегації тромбоцитів.

Розроблено методику кількісного визначення ТГ методом спектрофотометрії, придатну для дослідження повноти ступеня вилучення таблеток ЛЗ ТИКАГРЕЛОР, таблетки по 90 мг після доставки через НГ зонд.

Методику валідавано за показниками специфічність, точність, правильність, лінійність у вивченому діапазоні концентрацій, робастність. Підтверджено стабільність випробовуваних розчинів та розчинів порівняння у разі їх зберігання за кімнатної температури протягом 8 год.

**Методика кількісного визначення тикагрелору.** *Випробовуваний розчин 1.* Готують суспензію: подрібнюють 2 таблетки (по 90 мг) і суспендують їх в 50 мл води для хроматографії (подрібнюють таблетки протягом 60 сек за допомогою ступки та товкача, додають середовище для суспендування в ступку та перемішують протягом 120 сек за допомогою товкача); набирають суспензію в шприц і перемішують її протягом 15 сек. Проводять введення суспензії через шприц у трубку НГ зонду. Збирають суспензію в контейнер для збору (мірний стакан) та вимірюють рН суспензії після проходження через НГ зонд, промивають електрод 10 мл води для хроматографії, збирають промивні води у той же мірний стакан, далі переносять їх у мірну колбу на 200,0 мл та обмивають стакан додатковою кількістю води для хроматографії (10 мл). Промивні води (40 мл) наливають у ступку з товкачем. Обмивши посуд, промивні води зі ступки набирають у шприц, проштовхують через шприц в трубку НГ зонду для додаткового промивання, переносять промивні води у мірну колбу на 200,0 мл. Загальна кількість використаної води – 110 мл.

*Суміш розчинників:* ацетонітрил : вода для хроматографії (35:65 об/об). До *випробовуваного розчину 1* додають 70 мл ацетонітрилу, перемішують протягом 30 хв на магнітній мішалці, доводять об'єм розчину водою для хроматографії до об'єму 200,0 мл та перемішують. 1,0 мл одержаного розчину поміщають у мірну колбу місткістю 50,0 мл, доводять об'єм розчину сумішшю розчинників до позначки та перемішують. Одержаний розчин фільтрують крізь мембранний фільтр (*випробовуваний розчин 2*). 45,0 мг РСЗ тикагрелору поміщають у мірну колбу місткістю 100,0 мл, додають 70 мл суміші розчинників, перемішують протягом 30 хв на магнітній мішалці, доводять об'єм розчину тим самим розчинником до позначки та перемішують. 1,0 мл одержаного розчину поміщають у мірну колбу місткістю 25,0 мл, доводять об'єм розчину сумішшю розчинників до позначки та перемішують (*розчин порівняння*). Як *компенсаційний розчин* використовують суміш розчинників.

Вимірюють оптичну густину випробовуваного розчину 2 та розчину порівняння за довжини хвилі 300 нм у кюветі з товщиною шару 1 см відносно компенсаційного розчину.

Вміст тикагрелору ( $X$ ) у випробовуваному розчині 2, в міліграмах, обчислюють за формулою:

$$X = \frac{A \cdot m_0 \cdot 200 \cdot 50 \cdot 1 \cdot P}{A_0 \cdot 100 \cdot 25 \cdot 1,0 \cdot 100} \cdot \left(1 - \frac{W}{100}\right) = \frac{A \cdot m_0 \cdot P}{A_0 \cdot 25} \cdot \left(1 - \frac{W}{100}\right),$$

- де:  $A$  – оптична густина випробовуваного розчину;  
 $A_0$  – оптична густина розчину порівняння;  
 $m_0$  – маса наважки РСЗ тикагрелору, у міліграмах;  
 $P$  – вміст основної речовини в РСЗ тикагрелору, у відсотках;

$W$  – вміст вологи в РСЗ тикагрелору, у відсотках.

**Ступінь вилучення**

Ступінь вилучення ( $RF$ ) тикагрелору, у відсотках, обчислюють за формулою:

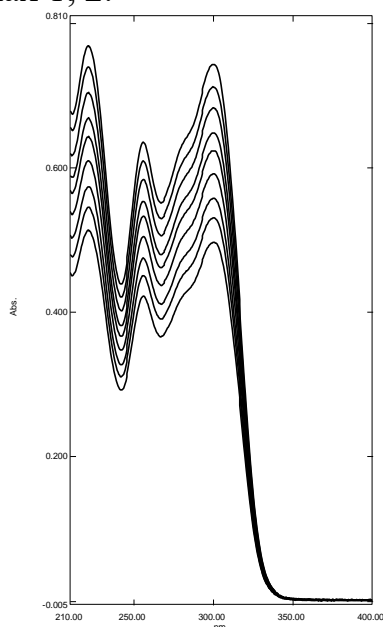
$$RF = \frac{X}{2 \cdot B} \cdot 100,$$

де:  $X$  – вміст тикагрелору у випробовуваному розчині, в міліграмах;

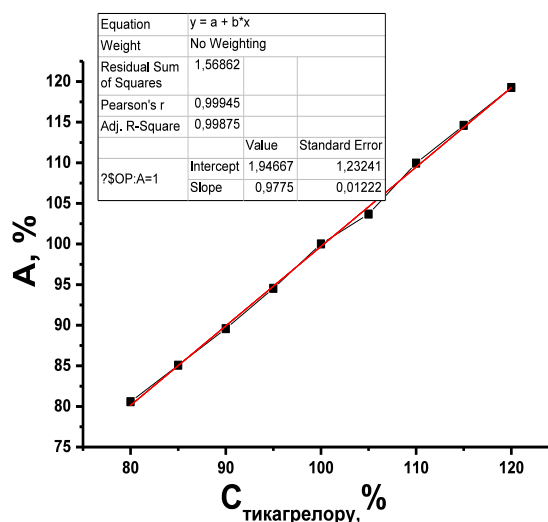
$B$  – середній вміст тикагрелору у таблетці (за результатами тесту «Кількісне визначення»), у міліграмах;

2 – кількість таблеток на одне визначення, шт.

УФ-спектри поглинання модельних розчинів для різних концентрацій ТГ та лінійна залежність оптичної густини від концентрації в нормалізованих координатах для визначення ТГ наведені на рисунках 1, 2.



**Рисунок 1** – УФ-спектри поглинання модельних розчинів для різних концентрацій ТГ



**Рисунок 2** – Лінійна залежність оптичної густини від концентрації в нормалізованих координатах для визначення ТГ

Метрологічні характеристики лінійної залежності кількісного визначення ТГ [3] представлені в таблиці 1.

**Таблиця 1** – Метрологічні характеристики лінійної залежності кількісного визначення тикагрелору

Величина	Значення	Допуски		Висновок
b	0,9775	Близько до 1		відповідає
a	1,94667	статистич.	≤ 2,33	відповідає
		практич.	≤ 2,56	відповідає
R	0,99945	≥ 0,99810		відповідає

Правильність визначали в межах діапазону використання аналітичної методики із застосуванням методу «введено-знайдено» (80 – 120 % від 45 мг), результати наведені в таблиці 2.

**Таблиця 2** – Результати визначення тикагрелору

Введено $X_i$ , мг		Знайдено $Y_i$ , мг		$Z_i = Y_i/X_i \cdot 100 \%$	
36,1		36,04		99,83	
36,0		36,11		100,31	
36,0		36,26		100,72	
45,0		44,72		99,38	
44,9		44,79		99,76	
45,1		44,86		99,47	
54,0		53,53		99,13	
54,0		53,74		99,52	
54,1		54,24		100,26	
середнє $\bar{Z}$ , %				99,82	
$S_Z$ , %				0,52	
$\delta \% =  \bar{Z} - 100 $				0,18	
Величина	Значення		Критерій		Висновок
$\delta \%$	0,18		статистич.	$\leq 0,32$	відповідає
			практич.	$\leq 0,51$	відповідає

Проведено перевірку внутрішньолабораторної прецизійності. Метрологічні характеристики методики представлені в таблицях 3 - 5 (зроблені в різні дні одним аналітиком).

**Таблиця 3** – Результати визначення та метрологічні характеристики методики кількісного визначення тикагрелору ( $f=5$ ;  $P = 0,95$ ;  $t(P, f) = 2,57$ )

№	$x_i$ , мг	$\bar{X}$ , мг	$S^2$	S	$\Delta \bar{X}$ , мг	$\varepsilon = \frac{\Delta \bar{X}}{\bar{X}} \cdot 100, \%$
1 день	90,15	90,43	0,63	0,70	0,66	0,73
	90,53					
	90,42					
	91,15					
	90,95					
	89,38					
2 день	90,78	90,85	0,39	0,43	0,41	0,45
	90,59					
	91,54					
	91,02					
	90,43					
	90,74					

Результати ступеня вилучення при вивченні доставки досліджуваного лікарського засобу ТИКАГРЕЛОР, таблетки, вкриті плівковою оболонкою,

по 90 мг та референтного лікарського засобу БРИЛІНТА, таблетки, вкриті плівковою оболонкою, по 90 мг, АстраЗенека АБ показали, що:

**Таблиця 5 – Критерій статистичної прийнятності**

<b>Процедура ANOVA (однофакторний дисперсійний аналіз), <math>P &gt; 0.05</math></b>						
Джерело варіабельності	<i>df</i>	<i>SS</i>	<i>MS</i>	<i>F</i> -тест	<i>P</i> -знач.	Висновок
Період часу	1	0,52920	0,52920	1,927	0,195	відповідає
Залишок	10	2,74580	0,27458			
Скориговане загальне	11	3,275	0,29773			

**Таблиця 6 – Критерій практичної прийнятності**

Об'єднаний довірчий інтервал, $\Delta_{\text{povt}}$	0,98
Критерій прийнятності	$\Delta_{\text{povt}} \leq 1.6$
Висновок	відповідає

- більш ніж 94 % ТГ вилучається після суспендування у воді та введення через НГ зонд. Ці результати показують, що ризик закупорки або непрохідності трубки був низьким, оскільки майже всі суспендовані частинки препарату пройшли після доставки ЛЗ через трубку НГ зонду даного (малого) діаметру;

- значення рН дисперсійного середовища, до та після введення через НГ зонд, для досліджуваного та референтного препарату практично однакові;

- ступінь вилучення ТГ після попереднього змочування та при безпосередньому введенні (без попереднього змочування) протягом 120 хв перед введенням у НГ зонд майже не відрізняється;

- досліджувані та референтні препарати ТГ є еквівалентними за варіабельністю ступеня вилучення при доставці через НГ зонд.

- довірчий інтервал (90 %-й) оцінки відношення досліджуваного до референтного ЛЗ задовольняють вимогам (80,00 %; 125,00 %), середньгеометричні значення ступеня вилучення для часу змочування 0 хв – 100,53 % / 102,37%; для часу змочування 120 хв – 99,45 % / 101,44%.

Досліджувані та референтні препарати тикагрелору є еквівалентними за ступенем вилучення при доставці через НГ зонд.

**НОВА СОРБЦІЙНО-АНАЛІТИЧНА СИСТЕМА  
ДЛЯ ТЕСТ-ВИЗНАЧЕННЯ ІОНІВ СРІБЛА**

Смагін І.О., Худякова С.М., Кондратюк Н.В.

Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара, 49045,  
м. Дніпро пр. Науки, 72

Забруднення навколишнього середовища є результатом антропогенної діяльності людини і знаходиться в прямій залежності від розвитку певних галузей промисловості та сільського господарства країни. Основними антропогенними забруднювачами навколишнього середовища є хімічна промисловість, металургія (чорна та кольорова). Забруднення важкими та токсичними металами підземних та поверхневих вод в межах проектного контуру кар'єрів, зони впливу гірничих робіт та хвостосховищ, а також контроль якості води, проби яких відібрано зі свердловин на прилеглих територіях житлових масивів вимагає постійного дослідження хімічного складу різних типів води, особливо питної. При цьому актуальним залишається розробка нових експресних методів аналізу, і особливо хімічних тест-систем – простих та дешевих прийомів виявлення та визначення токсичних компонентів, зокрема у питній воді.

Срібло є екологічно важливим елементом, який токсичний по відношенню до біологічних систем, що обумовлено його антагоністичними властивостями щодо деяких біологічно важливих видів, наприклад, міді, селену та вітаміну Е. Безпечна концентрація йонів  $Ag^+$  в організмі людини не перевищує 0,05 мг/кг, а в питній воді не вище 0,05 мг/л. Завдяки бактерицидним властивостям, сполуки срібла часто використовуються у фільтрах та іншому устаткуванні для очищення різних типів води та обробки продуктів харчування, напоїв і ліків, для підготовки питної води.

Низькі концентрації срібла у поєднанні з відносно високою (мМ) концентрацією лужних та лужноземельних іонів, а також у разі стічних вод, забруднених супутніми кольоровими металами, роблять пряме

визначення мікрокількостей іонів срібла дуже складним завданням. Отже, відділення від матричних елементів при отриманні концентрату важливе для інструментального аналізу. Вживані з цією метою методи концентрування мають бути, по можливості, простими, дешевими та експресними. Вказаним вимогам задовольняють сорбційні методи. Для концентрування та визначення благородних металів (БМ), у тому числі Ag, використовують сорбенти та тест-системи на основі ксерогелів силікатної кислоти (КГ), модифікованих органічними реагентами. Найбільш простий та доступний спосіб їх отримання – імпрегування КГ розчинами органічних реагентів з використанням водних або водно-органічних середовищ. Похідні димеркаптотіопірону (ДТ) є ефективними модифікаторами матриць різної природи для концентрування та експресного визначення деяких БМ. У роботі для отримання матриці-основи застосовували рідке скло; відповідні етапи включали очищення та зневоднення гелю у ході його висушування. Меланж-золь-гель технологія була застосована для отримання силікатного сорбенту з іммобілізованим фенілпохідним реагенту ДТ. Даний сорбент виявився інертним по відношенню до цілого ряду лужних металів, а також не утворював твердофазні комплекси з іонами Zn(II), Mn(II), Al(III), Ni(II), Co(II), Cr(III, IV), Fe(II, III), що забезпечувало його високу селективність. За результатами контролю вмісту Ag(I) в розчинах після сорбції встановлено кількісне вилучення даного йону в інтервалі кислотності від 0.1 М HCl (0.5 М H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>) до pH 4. За результатами проведеного дослідження розроблено тест-шкалу візуальної оцінки вмісту Ag(I) в різних типах води в інтервалі концентрацій  $(0.1-4) \times 10^{-6}$  М при pH 4 в об'ємі проби 10 мл.

## **ВИЗНАЧЕННЯ МИШ'ЯКУ В ПРОДУКТАХ І ОБ'ЄКТАХ ДОВКІЛЛЯ**

**Тріско О.О., Сидорова Л.П.**

*Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара,*

**Проспект Науки, 72, 49000 Дніпро, Україна**

**e-mail: [trisskaaaa@gmail.com](mailto:trisskaaaa@gmail.com)**

Проблема токсичного впливу арсену на організм людини відома щонайменше з III тис. до н.е., що підтверджується виявленням підвищеного вмісту цього елемента в останках шахтарів мідних копалень. Завдяки своїм фізико-хімічним властивостям арсен широко застосовувався протягом століть у металургії, фармацевтиці, сільському господарстві, а в сучасному світі – у виробництві напівпровідникових матеріалів. Однак його активне використання спричинило серйозне забруднення навколишнього середовища, що залишається актуальною екологічною проблемою. У межах цієї роботи були досліджені та порівняні сучасні методи визначення арсену в навколишньому середовищі та харчових продуктах.

У рамках роботи були розглянуті спектроскопічні, електрохімічні та спектрофотометричні методики. Таблиця 1 містить їхню порівняльну характеристику.

Табл. 1 Порівняльна характеристика методик визначення арсену

№	Методика	Межа визначення, ppb	Час, хв	Посилання
1	ВЕРХ-ІЗП-МС	0,04-0,07	15-30	[1]
2	ІЗП-МС	0,29-0,52	5-10	[2]
3	ААС з генерацією гідридів	0,68	10-15	[5]
4	Електрохімічні методики	0,0008-2,1	10-20	[7]
5	Спектрофотометрія із толуїдиновим синім або сафраніном О	308 або 250	15-30	[8]
6	Спектрофотометрія із ванілін-2-амінонікотиновою кислотою	60	15-30	[9]
7	Спектрофотометрія з молочнокислими бактеріями	60	30	[4]
8	Спектрофотометрія з Родаміном В	9,16	15-30	[6]

*XXIII Всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань сучасної хімії, Дніпро, 19-22 травня 2025 р.*

ВЕРХ-ІЗП-МС: Методика застосовувалась для аналізу зразків деревного моху і полягала у поєднанні ВЕРХ в якості методу екстракції із ІЗП-МС. ІЗП-МС: Методика передбачує визначення загальної кількості Арсену (tAs) і шести сполук (арсеніту ( $\text{As}^{\text{III}}$ ), арсенату ( $\text{As}^{\text{V}}$ ), арсенобетаїну ( $\text{AsB}$ ), арсенохоліну ( $\text{AsC}$ ), монометиларсенової к-ти (ММА) та диметиларсенової к-ти (ДМА)) у морепродуктах. Вимірювання концентрації tAs проводили за допомогою квадрупольної мас-спектрометрії з індуктивно-зв'язаною плазмою. Процедура підготовки тканинних зразків для аналізу загального миш'яку (tAs) базувалася на методі розкладу тканинних зразків.

ААС з генерацією гідридів: Дана методика пропонує використання системи генерації гідридів у поєднанні з флуоресцентною атомно-абсорбційною спектрометрією для визначення миш'яку у природній воді. Метод заснований на вимірюванні атомної абсорбції миш'яку в питній воді, що утворюється в результаті розкладання гідриду миш'яку

Електрохімічні методики: Розглянуті різноманітні варіанти електродів для визначення арсену у ґрунтових водах із межею визначення від 0,0008 до 2,1 ppb. Переважно використовується СВЕ та наноматеріали у якості модифікаторів.

Спектрофотометрія із толуїдиновим синім або сафраніном O: Цей метод ґрунтується на реакції миш'яку(III) з калій йодатом у кислому середовищі з вивільненням йоду. Вивільнений йод знебарвлює синій колір толуїдинового синього або рожево-червоний колір сафраніну O, після чого відбувається спектрофотометричне визначення.

Спектрофотометрія із ванілін-2-амінонікотиною кислотою: Запропоновано новий чутливий реагент VANA для екстракційно-спектрофотометричного визначення слідів As(III). Метод вирізняється високою чутливістю, селективністю, простотою, швидким утворенням кольору та незначними впливами завад.

Спектрофотометрія з молочнокислими бактеріями: Мікроорганізми молочнокислі бактерії у вигляді іммобілізованої клітини на твердій основі було представлено як новий біосорбент для простого та чутливого спектрофотометричного визначення As(III) у різних зразках води.

Спектрофотометрія з Родаміном В Ця методика описує спектрофотометричне визначення арсену ( $\text{As(V)}$ ) за допомогою молібдат-ванадатної реакції з подальшим утворенням забарвленого комплексу з Родаміном В.

Таким чином, застосування електродів для кількісного визначення Арсену має переваги економічного характеру, як у плані фінансів, так і необхідності підготовки працівника для проведення даного аналізу. Проте із підвищенням вимог до межі визначення, застосування електродів стає все менш можливим. Перспективним шляхом розвитку елетрохімічних методів визначення Арсену є розробка модифікованих наночастинками електродів, які вже показують високу ефективність у поєднанні із багатьма електрохімічними методиками.

Спектрофотометричні методики заслуговують особливої уваги, так як володіють достатньо високою точністю, не потребують високої кваліфікації й мають значно меншу вартість, порівняно із спектрометричними методиками. Не дивлячись на те, що їхня точність недостатньо висока, щоб визначати відповідні до рекомендацій ВООЗ концентрації арсену, це перспективні та оптимальні за зручністю методики.

Проте найбільш розповсюдженими залишаються спектральні методи аналізу, особливо такі як мас- та атомно-абсорбційна спектрометрії. Їхнім основним недоліком є коштовне обладнання та відносна складність проведення аналізу. Проте серйозними перевагами є висока точність, можливість мультиелементного аналізу та низькі межі виявлення. Варто зазначити, що спектральні методики для більшої ефективності

застосовують у тандемі із попереднім хроматографічним розділенням та/або різними методиками концентрування.

#### **ВИКОРИСТАНІ ДЖЕРЕЛА**

1. Nan, Kai et al. "Arsenic speciation in tree moss by mass spectrometry based hyphenated techniques." *Talanta* vol. 183 (2018): 48-54. <https://doi:10.1016/j.talanta.2018.02.055>
2. Nawrocka A., Durkalec M., Michalski M., Posyniak A. (2022) "Simple and reliable determination of total arsenic and its species in seafood by ICP-MS and HPLC-ICP-MS" *Food Chemistry* vol.379, 132045. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2022.132045>
3. Bryszewska, Malgorzata & Hannam, Stacey & Muñoz-Olivas, Riansares & Cámara. (2009). Direct Arsenic Determination in Exposed Embryos of Zebrafish (*Danio rerio*) with Zeeman Electrothermal Atomic Absorption Spectrophotometry. *Spectroscopy Letters*. 42. 363-369. [10.1080/00387010903185751](https://doi.org/10.1080/00387010903185751)
4. Rayanuthalakishorekumar, kishore kumar & Venkateswarlu, S. & Reddy, K. & Tulasamma, P. & Govind, Varadhi & Jyothi, n v & Venkateswarlu, P.. (2011). Arsenic (III) determination by spectrophotometry coupled with preconcentration technique in water samples. *Journal of Chemical and Pharmaceutical Research*. 3. 626-634.
5. Irfana Mariam, Iram Khan, Sabeen Jaffar, Faiza Shahid, Islam-Ullah Khan, Aminah Suhail Qureshi and Ali Nawaz (2016). Study of Arsenic Impurity in Water of Lahore by Hydride Generation Atomic Absorption Spectrophotometry. *International Journal of Current Research in Biosciences and Plant Biology*. Vol. 3, №4. <http://dx.doi.org/10.20546/ijcrbp.2016.304.001>
6. V., Kavitha. (2015). Spectrophotometric determination of trace amounts of arsenic in sediment, flyash and water samples. *International Journal of ChemTech Research*. 7. 2333-2340.
7. Abhijnan Bhat, Tony O Hara, Furong Tianc and Baljit Singh (2023) Review of analytical techniques for arsenic detection and determination in drinking water. *Environmental Science Advances*. Vol.2, #2, p.143-348
8. Narayana, Badiadka & Cherian, Tom & Mathew, M. & Pasha, Dr. (2006). Spectrophotometric determination of arsenic in environmental and biological samples. *Indian Journal of Chemical Technology*. 13. 36-40.
9. K. Deepa, Himagirish Kumar S., Y. Paul Raj, N. V. V. Jyothi and Y. Lingappa. A simple spectrophotometric method for the determination of arsenic in industrial and environmental samples using vanillin-2-amino nicotinic acid (VANA). *Der Pharmacia Lettre*, 2015, 7 (7):345-352

## **НАКОПИЧЕННЯ d - МЕТАЛІВ В НАСІННІ ДЕРЕВНИХ РОСЛИН**

Андрейченко К.В., Хмельникова Л. І.  
Дніпровський державний медичний університет  
м. Дніпро, вул. Володимира Вернадського, 9

d-метали мають властивість концентруватися в репродуктивних органах деревних рослин.

Критичний аналіз світової літератури виявив найбільш пріоритетні напрямки застосування репродуктивних органів деревних рослин у медичній практиці. Їх сировину використовують як протизапальні, протипухлинні, антимікробні, протигрибкові, противірусні, гемостатичні, протиалергічні, муколітичні, тонізуючі засоби, для лікування запальних процесів шкіряного покриву (фурункули, висипання, короста) та астматичного кашлю [1]. Репродуктивні органи деревних рослин містять наступні біологічно – активні речовини: тритерпенові сапоніни, флавоноїди, фенольні сполуки, галактоманнани, алкалоїди, амінокислоти [2].

Мета роботи – оцінити накопичення d - металів в насінні деревних рослин, що мають фармакологічне значення, та використовувати цю інформацію як інтерактивний підхід у викладанні аналітичної хімії.

Об'єктами дослідження були насіння деревних рослин – робінії псевдоакації (*R.pseudoacacia*), гледичії трьохколючкової (*G. triacanthos L.*), кленів: ясенелистого (*Acer nigrundo L.*), гостролистого (*Acer platanoides L.*), псевдоплатанового (*Acer pseudoplatanus L.*). Накопичення ВМ визначали методом атомно - абсорбційної спектрометрії на приладі С-115М з програмним забезпеченням.

Коефіцієнт накопичення (Кн) важких металів розраховували як відношення кількісного вмісту метала в насінні дослідних рослин до цього

*XXIII Всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань сучасної хімії, Дніпро, 19-22 травня 2025 р.*

показника в контрольних зразках. Для характеристики впливу ВМ на насіння деревини визначали масу 1000 штук плодів та насіння.

В результаті дослідження виявлено, що насіння деревних рослин досить активно акумулює ВМ, вміст яких дуже варіював. Найнижча концентрація ( $0,12 \pm 0,01$  мг/кг) виявлена для кадмію (Cd) в насінні контрольних рослин робінії псевдоакації і клену ясенелистого. У представників сімейства кленів: псевдоплатанового та гостролистого цей показник був вищий у 1,34 та 1.84 рази, відповідно.

Максимальною здібністю накопичення Cd відрізнялися клен ясенелистий та робінія псевдоакація ( $K_n=1.58$ ). Вміст свинцю (Pb) в насінні досліджуваних деревних порід був вищий, ніж Cd в середньому у 4 рази. Максимальною здібністю накопичення Pb відрізнялися дослідні зразки гледичії трьохколючкової ( $K_n=1.40$ ). Відмінності між найвищим вмістом міді (Cu) у клену гостролистого та найменшим у робінії псевдоакації становили 2,63 - 3,6 рази відповідно.

У представників сімейство бобових - гледичії трьохколючкової коефіцієнт накопичення ( $K_n$ ) Cu був найбільшим. Концентрація марганцю (Mn) була найвищою в дослідних зразках насіння гледичії трьохколючкової при найвищому  $K_n = 2,0$ . Вміст цинку (Zn) у контрольних зразках розрізнявся в 2,6 рази між насіннями клену псевдоплатанового (максимум) і робінії псевдоакації (мінімум).

Рівень заліза (Fe) також варіював від низького у представників сімейства кленів до найвищого у гледичії трьохколючкової. Максимальною здібністю накопичення нікелю (Ni) відрізнялося насіння рослин робінії псевдоакації ( $K_n=2.40$ ). Найбільш високою акумулюючою здібністю ВМ у насінні відрізнялися робінія (Ni, Fe, Cd), гледичія (Mn, Cu), клен ясенелистий (Cd Zn).

Серед ВМ найнижча концентрація відзначена для Cd, найбільша – для Fe. Ступінь накопичення металів у насінні різних видів дерев сильно відрізнялася, особливо високою вона була для Cu, Zn та Mn.

Таким чином, накопичення ВМ у насінні дерев мали свої особливості для кожного з вивчених видів рослин та металів. Дослідження впливу техногенного забруднення на метаболізм репродуктивних органів деревних рослин свідчить про їх чутливість до дії поллютантів, що підтверджується підвищенням коефіцієнта накопичення важких металів. Крім того, зростання здатності металів до накопичення в насінні, на прикладі *R. pseudoacacia* L. має свій закономірний вигляд, а саме: Pb, Zn, Mn, Cu, Fe, Ni, Cd.

Список літератури:

1. Lozano F. Basic Theories of Traditional Chinese Medicine. In: Lin Y.-C., Hsu E. S.-Z. Acupuncture for Pain Management. New York: Springer, 2014. P. 13-43.
2. Rakhmanberdyeva R.K., Rakhimov D.A., Vakhabov A.A., Khushbaktova Z.A., Syrov V.N. Galactomannan from *Gleditsia macracantha* seeds and its biological activity. Chemistry of Natural Compounds. 2005; 41(1):11-13.

## **АНАЛІЗ КІЛЬКІСНИХ МЕТОДІВ ВИЗНАЧЕННЯ ВІТАМІНІВ ГРУПИ В**

Маторіна К.В., Жук Л.П., Токарєв М.В.

*Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара,  
проспект Науки, 72, 49000 Дніпро, Україна*

Вітаміни є необхідними компонентами для нормального та здорового функціонування людського організму. Особливо це стосується вітамінів групи В, вони займають вирішальну роль у підтримці загального стану людського здоров'я, необхідні для великої кількості метаболічних процесів. Спектр їх дії достатньо широкий, починаючи з перетворення вуглеводів, жирів, амінокислот в енергію і синтезу жирних кислот, холестерину, ензимів, гормонів, ДНК, формуванні еритроцитів, закінчуючи підтримкою нормального стану шкіри, очей, імунної системи та роботи мозку.

Нестача вітамінів групи В призводить до тяжких наслідків, таких як анемія, дерматити, порушення метаболізму, роботи імунної системи і серця. Враховуючи вищеперераховані фактори, можна з впевненістю сказати, що вітаміни групи В є важливим об'єктом дослідження через свою вкрай важливу необхідність для людини.

Вітаміни групи В відіграють ключову роль у підтримці життєдіяльності організму, тому точне визначення їх концентрації у різних матрицях (харчові продукти, фармацевтичні препарати, біологічні рідини) є критично важливим. Методи аналізу, розглянуті у роботі, демонструють різноманітні підходи до їх визначення. Кожен метод має як свої безперечні переваги, так і певні обмеження.

Сучасні методів визначення вітамінів групи В мають суттєве значення з огляду на бурхливий розвиток виробництва медичних препаратів і БАД. Останні досягнення аналітичних методів, таких як електрохімічні чутливі детектори, в тому числі і потенціометричні, значно

підвищили точність, експресність і ефективність визначення цільових компонентів.

Систематизовано різні групи методів визначення, методів виділення та очищення, узагальнено дані стосовно оптимізації методів за практичними умовами та проведено їх порівняння. Найбільш перспективними є наступні методи: високоефективна рідинна хроматографія (HPLC), газова хроматографія-мас-спектрометрія (ГХ-МС), рідинна хроматографія-мас-спектрометрія (LC-MS), ультра-високоефективна рідинна хроматографія (UHPLC), високоефективна рідинна хроматографія з флуоресцентною детекцією (HPLC-FLD), електрохімічні методи з вугільно-пастовим електродом (ВПЕ) та скляним вуглецевим електродом (GCE).

Для оцінки методів складено таблицю основних характеристик: LOD, LOQ, часу аналізу і селективності, значення якої оцінювалось відносно значень LOQ і LOD (табл.1). З представленої таблиці добре видно, що, відносно інших методів, найбільшою швидкими є електрохімічні методи, а найповільнішими – мікробіологічні; LC-MS/MS – найбільш чутливі, в той час як спектрофотометричні методи, ВПЕ, діамантові і графітові електроди – найменш чутливі; інші хроматографічні методи, флуоресцентні і мікробіологічні методи – найбільш селективні.

Хроматографічні методи (різновиди HPLC, LC-MS/MS, LC) добре підходять для точних визначень завдяки високій чутливості та можливості аналізувати складні суміші. Наприклад, LC-MS/MS з межею виявлення до 0,001 мкг/мл є незамінним для клінічних досліджень, але його висока вартість та складність пробопідготовки обмежують застосування в рутинному аналізі. Електрохімічні методи, такі як вольтамперометрія з модифікованими електродами (наприклад, MWCNT/GCE), виділяються швидкістю (5–15 хв), низькою вартістю та можливістю використання в

*XXIII Всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань сучасної хімії, Дніпро, 19-22 травня 2025 р.*

польових умовах, що робить їх гарним варіантом для експрес-аналізу, але їх точність може знижуватися в складних матрицях саме через матричні ефекти. Спектрофотометрія та флуоресцентна детекція є доступними та простими, але обмежені низькою селективністю для нефлуоресцентних вітамінів і потребують додаткової підготовки зразків.

Таблиця 1 – Порівняння методів визначення вітамінів групи В

Метод	LOQ, мкг/мл	LOD, мкг/мл	Селективність у цільовому зразку	Час аналізу
HPLC-UV	0,1-1,0	0,05-0,5	Висока	15-40 хв
UHPLC	0,05-0,2	0,02-0,1	Висока	5-15 хв
HPLC-FLD	0,01-0,2	0,005-0,05	Дуже висока	20-60 хв
LC-MS/MS	0,001-0,01	0,0005- 0,005	Найвища	10-30 хв
Мікробіологічний	0,01-0,1	0,001-0,01	Висока	20 хв – 48 год
Спектрофотометричний	0,1-0,5	0,05-0,1	Середня	15-30 хв
Флуоресцентний	0,05-0,2	0,01-0,05	Висока	5-15 хв
Електрохімічні методи				
GCE	0,02-0,1	0,01-0,05	Висока	3-15 хв
Графітові електроди	0,1-0,3	0,03-0,1	Середня	
ВПЕ	0,1-0,5	0,03-0,1	Середня	
Сенсори	0,01-0,1	0,001-0,05	Висока-середня	
Модифіковані електроди	0,05-0,2	0,01-0,05	Висока	
Діамантовий електрод	0,2-0,5	0,1-0,3	Середня	

Важливим напрямком сучасних досліджень є інтеграція нанотехнологій (наприклад, нанокомпозитів, іонних рідин) для підвищення чутливості та стабільності електрохімічних сенсорів, а також розробка портативних аналітичних систем. Тенденція до автоматизації та

полегшення методів відкриває нові можливості для швидкого аналізу в умовах промисловості.

Сучасні методи визначення вітамінів групи В характеризуються різноманітністю підходів до визначення, що дозволяє підібрати метод для кожного конкретного зразка, відштовхуючись від умов аналізу. Методи LC-MS/MS, HPLC дозволяють проводити високоточні виміри у складних матрицях, а особливо для одночасного визначення; електрохімічні є простими і швидкими, для визначення компонентів із специфічними властивостями.

Тенденцією останніх років є інтеграція нанотехнологій та сенсорів для підвищення чутливості, селективності і стабільності методів. Наприклад використання нанокompatитів (CNT, оксидів металів) у електрохімії фбо MRM-режим в LC-MS/MS що дозволяє аналізувати слідові кількості компонентів. Також, розробка швидких хроматографічних методів (UHPLC) та портативних електрохімічних сенсорів надає нові можливості для аналізу в різноманітних умовах. Подальший розвиток методів спрямований на мінімізацію часу, полегшення самого аналізу і пробопідготовки, зниження вартості для більш доступного аналізу.

Вибір оптимального методу залежить від конкретних потреб визначуваного зразку: для складних матриць і низьких концентрацій незамінний LC-MS/MS; для рутинного моніторингу в промисловості — HPLC або електрохімічні сенсори; для швидкого скринінгу — спектрофотометрія або електрохімічні сенсори. Систематизація методів демонструє сучасну тенденцію на зниження вартості аналізу, розробку універсальних методів та фісілатацію пробопідготовки для складних зразків, що, в свою чергу, робить якісне визначення простішим і доступнішим.

**ПЕРСПЕКТИВИ ЗАСТОСУВАННЯ АЗОРЕАГЕНТІВ ДЛЯ  
ВИЗНАЧЕННЯ НІТРОГЕНОВМІСНИХ СПОЛУК У ВИГЛЯДІ  
ІОННИХ АСОЦІАТІВ**

Жук Л.П., Маторіна К.В., Бовкун В.Д., Борода Ю. Є.  
*Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара*  
49010, м. Дніпро, просп. Науки, 72  
[boroda\\_u@365.dnu.edu.ua](mailto:boroda_u@365.dnu.edu.ua)

Важливу роль для життя і здоров'я всього живого відіграють нітрогеновмісні сполуки, з яких найвідомішими є амінокислоти і білки. Проте, сьогодні суттєвого значення набувають ті речовини, які використовують як харчові добавки [1] та лікарські сполуки [2]. Зростання асортименту нітрогеновмісних сполук і сфер їх застосування спонукають до пошуку простих методик їх контролю в різноманітних об'єктах: від продуктів харчування та лікарських засобів до питної і мінеральної вод. Серед доступних методів аналізу є спектрофотометричні та фотометричні методики у видимій області спектру, які потребують наявності забарвлених аналітичних форм. Цікавим в цьому відношенні є застосування органічних барвників з метою одержання іонних асоціативних комплексів [3], але суттєвим недоліком з точки зору екологічності та зеленої хімії є проведення визначення в середовищах органічних розчинників.

Серед відомих спектрофотометричних методик визначення нітрогеновмісних сполук поширено застосування трифенілметанових барвників (тимоловий синій, бромфеноловий червоний, бромкрезоловий зелений, флуоресцеїн, еозин тощо). Базуються ці методики на здатності до асоціації між катіонами нітрогеновмісних сполук, які є слабкими органічними основами та аніонами трифенілметанових реагентів, відтворюваність властивостей яких досягається застосуванням або органічних розчинників, або поверхнево-активних речовин [3]. Перспективними для отримання аналітичних форм представляються

азореагенти. Це один з найбільш поширених класів органічних барвників (близько 60% усіх барвників), що мають різноманітну гаму кольорів, дають контрастні реакції з катіонами металів та значні зміни спектрах ( $\epsilon_{\text{IA}} / \epsilon_{\text{барвника}} > 150$ ), за певних умов, завдяки просторовій будові, забезпечують селективність реакцій, крім того утворювані комплекси з металами характеризуються високою стійкістю [4]. Шляхи отримання можуть включати як водні розчини, так і середовища органічних розчинників або поверхнево-активних речовин та поліелектролітів. Іонні асоціати успішно використовуються для конструювання високочутливих елементів потенціометричних сенсорів. Напрямок з розширення асортименту детекторів такого типу розвивається, маючи на меті досягнення низьких меж визначення та поліпшення параметрів експресності.

Таким чином, дослідження отримання аналітичних форм на основі утворення іон-асоціативних комплексів азореагентів з нітрогеновмісними сполуками можуть служити джерелом розробки цінних методик контролю якості лікарських сполук, харчових добавок та широкого кола об'єктів довкілля.

#### Перелік посилань

1. Електронний ресурс: [https://food.ec.europa.eu/horizontal-topics/international-affairs/international-standards/codex-alimentarius/ccfa\\_en; documents/kodeks-alimentarius-sxg-36-1989](https://food.ec.europa.eu/horizontal-topics/international-affairs/international-standards/codex-alimentarius/ccfa_en; documents/kodeks-alimentarius-sxg-36-1989).
2. Електронний ресурс: [https://moz.gov.ua/uploads/0/3799-nasperelic\\_dodatok\\_web.pdf](https://moz.gov.ua/uploads/0/3799-nasperelic_dodatok_web.pdf)/ Національний перелік Основних лікарських засобів.
3. Використання у фармацевтичному аналізі іонних асоціативних комплексів, що утворюються між сульфонефталеїновими барвниками та азотовмісними сполуками в середовищі органічних розчинників / М. Аль-Швайят, К. Галкіна, Л. П. Сидорова та ін. //Журнал хімії та хім. технологій. – 2023. – Т. 31. - № 4. - С. 713-726.
4. Рахлицька О. М. Органічні реагенти в аналітичній хімії / О. М. Рахлицька, Т. М. Щербакова, О. М. Гузенко. – Одеса : Одес. нац. ун-т ім. І. І. Мечникова, 2021. – 112 с.

**THE INFUSION OF INORGANIC ANIONS INTO THE INTERACTION OF CPAA WITH ORGANIC BARBERRIES AND CHELATE COMPLEX ANIONS**

Cherniavska A.Yu., Vishnikin A.B.  
Oles Gonchar Dnipro National University  
Dnipro, Nauki av., 72

Cationic flocculants of the polyacrylamide type (CPAA) are widely used for the purification of natural and industrial waters. Currently in Ukraine there are daily regulations on control methods instead of CPAA. Therefore, there is an urgent need for the testing of consistent methods of analysis. Using spectrophotometric methods for identifying other cationic polyelectrolytes (PE), which are based on established ion associates (IA) of anionic organic barberries (OB) with PE. They can be used instead of flocculants on the level of HDK in waters of various types, including simple ones, express, and easy to automate. The biggest problem facing us is the significant influx of strong electrolytes. This will require the search for such analytical systems, in which the stability of cationic PEs with anionic PEs and other barbed protons is much greater than with accompanying anions. In addition to traditional analytical forms based on IA with sulfophthalein and fluorescein anionic agents, the current search for reagents in the middle of chelate complex compounds. Indirect influx, which is manifested by anions and nitrogen-containing organic reactions on the interaction of barnberries with polyelectrolytes, which have not yet been used for the identification of these substances.

This work involves the infusion of several inorganic anions and nitrogen-containing organic compounds into the formulation of IA OB and chelate complex anions with CPAA. At a concentration of sodium chloride, which is typical for drinking water, the IA of fluorescein barberries with CPAA is less than 10%. The least stable is the IA with FF, which collapses almost entirely, and the stage of transformation of other barbarians is in the range of 20 to 80%. One of the most accurate analytical forms for the determination of CPAA is IA

with fluorescein barium. For waters with a small amount of salts, you can use IA with BFS or ВКР.

The resistance IA of organic barberries with CPAA was assessed in relation to the concentration of chloride ions (Fig. 1).

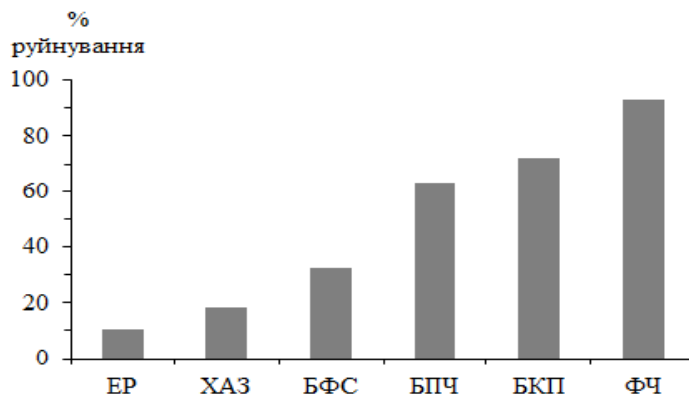


Fig. 1. Infusion of the nature of the barnberry onto the ruins of IA OB-FO4990SH at a concentration of 0.5 g/l NaCl.

Although the stability of IA CPAA with the main inorganic anions that are found in natural waters, in such systems it is a tenth of an order of magnitude lower, lower IA ABOUT with PE, but rather high concentrations of salts in real objects of analysis, the stench causes a significant influx. Estimates of the influx of anions and salts present in natural waters are at the highest level (Fig. 2).

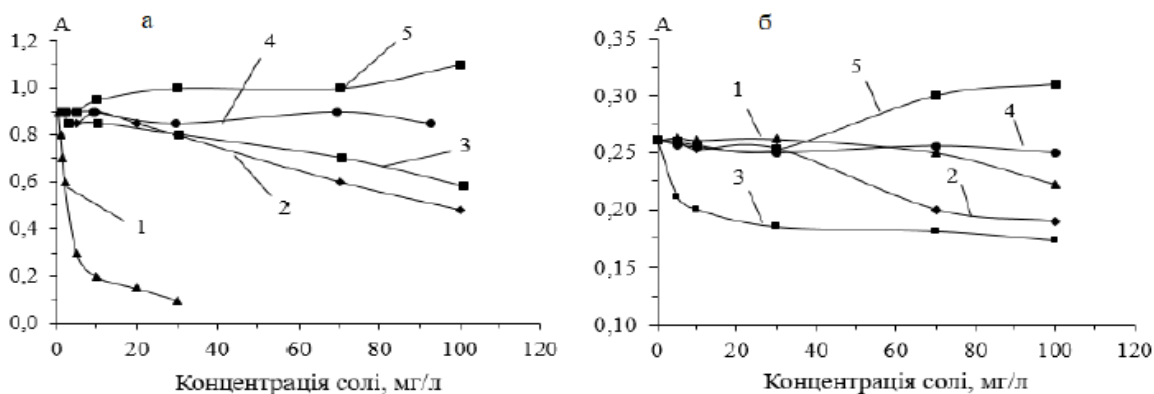


Fig. 2. Deposit of optical thickener IA FO4990SH-BKP (a) and FO4990SH-BFS (b) in the presence of inorganic salts.  $\lambda = 590 \text{ nm}$ , pH = 4.65 (a), 3.50 (b). Salts: 1 -  $\text{Na}_2\text{SO}_4$ , 2 –  $\text{NaCl}$ , 3 –  $\text{NaNO}_3$ , 4 –  $\text{Na}_2\text{HPO}_4$ , 5 –  $\text{Na}_2\text{CO}_3$

The strongest concentration of IA CPAA-BCP is caused by sulfate ions. Its influx becomes noticeable, starting at 0.1 mg/l. (Fig. 2a). Chloride and nitrate anions are used, starting at a concentration of 20 and 10 mg/l. A small amount of phosphate ions practically does not flow onto the light-polished IA BKP-KPAA. The presence of carbonate ions leads to an increase in light intensity, so that the analysis results are inconsistent. This will require their preliminary removal when analyzing the samples in boiling water with chloride acid. In natural waters, chloride is usually located near the active quantities, and nitrate is located in much smaller, lower sulfate anions, then the destruction of IA KPAA-BKP by sulfate ions can be vicorized for control instead remaining near a wide range of natural waters.

In a different way, inorganic anions are poured onto light-polished IA BFS-KPAA. The greatest influx in this phase is nitrate (Fig. 2b, curve 3). Chloride and sulfate ions in a concentration of up to 40 mg/l are practically not poured onto light-polished IA CPAA-BFS.

The presence of salts in natural waters in concentrations that are more critical leads to a change in light clay, which creates a complexion when the IA KPAA-OB is frozen. It has been shown that the stagnation of the additive method allows, with less than 50% destruction of IA, to compensate for the significant influx of inorganic ions.

When investigating the infusion of inorganic salts into the solution of IA KPAA with chelate complexes, it was found that, in contrast to the behavior of IA KPAA-OB, the introduction of inorganic salts in concentrations of at least 0.5 g/l do not make a significant difference to the solution of IA CPAA with chelate complexes.

Секція

**ОРГАНІЧНА ТА  
ФАРМАЦЕВТИЧНА  
ХІМІЯ**

**Керівник: проф., д-р хім. наук Пальчиков Віталій  
Олександрович**

**Секретар: проф., д-р фарм. наук Коваленко  
Сергій Іванович**

**IN SILICO ДОСЛІДЖЕННЯ 3-R-БЕНЗО[f][1,2,4]ТРИАЗИНО[2,3-d]–  
[1,4]ДІАЗЕПІН-2,7(6H,8H)-ДІОНІВ**

Бершак А., Коптева С.Д., Коваленко С.І.

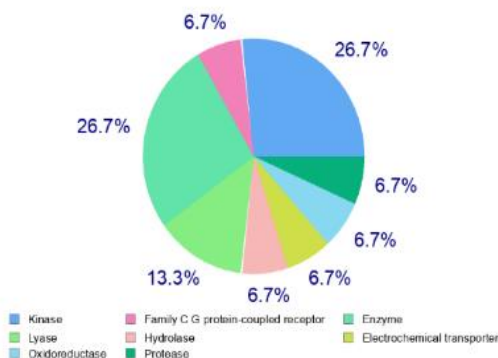
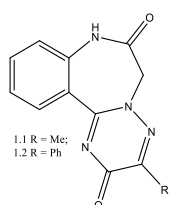
Дніпровський національний університет ім. Олеся Гончара,  
м. Дніпро, проспект Науки 72

1,4-Діазепіни важлива група гетероциклічних сполук з різноманітною біологічною активністю, а саме антипсихотичною, анксиолітичною, проти–судомною, анагетичною, антигельмінтною, антибактеріальною, проти–грибковою, протираковою та іншими [1, 2], які знайшли застосування у медичній практиці та зберігають значний синтетичний та біологічний потенціал у плані пошуку нових перспективних біологічно активних речовин для потенційного використання у фармацевтичній промисловості. Велика кількість біологічних досліджень привела до синтезу цілого класу бензодіазепінів з більш широким спектром фармакологічної дії [3]. Крім того, на даний час синтезовані біологічно активні 1,4-бенздіазепінові системи поєднані з 5-членним карбоциклами, азолами та азинами [4, 5].

Незважаючи на те, що вищезазначені структури є досить перспективними, на сьогодні не всі класи азинобенздіазепінових систем є дослідженими. Отже, існує необхідність у подальшій розробці нових класів недостатньо вивчених структур, а саме бензо[f][1,2,4]триазино[2,3-d]–[1,4]діазепінів у пошуках нової хімії, нової методології і, отже, нових біологічних властивостей.

Метою роботи є *in silico* біологічне дослідження 3-R-бензо[f]–[1,2,4]триазино[2,3-d][1,4]діазепін-2,7(6H,8H)-діонів для обґрунтування необхідності розробки методів їх синтезу та вивчення фармакологічної дії.

Результати прогнозу біологічної активності проведені за допомогою сайту SwissTargetPrediction [6] невідомих 3-R-бензо[f][1,2,4]триазино[2,3-d]–[1,4]діазепін-2,7(6H,8H)-діонів щодо їх впливу на класи біологічних мішеней показали (рис. 1), що зазначені структури у більшій мірі здатні інгібувати або ініціювати кінази, лігази та оксиредуктази (до 26,7%; 26,7% та 13,3%, відповідно) системи. В меншій мірі взаємодіяти з G-білковими сигнальними системами (6,7%) та ензимами (6,7%). Більш детальний аналіз показав, що для них можлива протипухлинна активність, а саме вплив на циклін-залежну кіназу 1 та 2 типу, серин/треонін-протеїнкіназу, аурору-В та рецептор фактора росту ендотелію судин 2. Нейропротекторна активність для даного класу сполук може проявлятися за рахунок впливу на ГАМК-рецептори.



Рецептор фактора росту  
ендотелію судин 2

Серин/треонін-протеїнкіназа  
Aurora-B

Циклін-залежна кіназа 2

Циклін-залежна кіназа 1

Метаботропний ГАМК-  
рецептор 5

Моноацилгліцеролліпаза

Лужна фосфатаза, тканинний  
неспецифічний ізофермент

Моноліцеролліпаза

Анандамідамідогідролаза

Вугільна ангідраза I та II типу

Ацетилхолінестераза

Натрій/водневий насос 1

Рисунок 1. Принципова будова 3-R-бензо[*f*][1,2,4]триазино[2,3-*d*][1,4]-діазепін-2,7(6*H*,8*H*)-діонів та прогностичний розподіл біомішеней за класами згідно SwissADME

Крім того, проведено визначення відповідності 3-R-бензо[*f*]-[1,2,4]триазино[2,3-*d*][1,4]-діазепін-2,7(6*H*,8*H*)-діонів критеріям токсичності та «лікоподібності» з використанням сайт-ресурсів ProTox-III [7] та SwissADME [8]. Результати дослідження токсичності показали (табл. 1), що сполуки, які пропонуються в якості об'єктів для синтезу та подальших досліджень *in vivo*, належать до IV класу токсичності. Для сполук характерним є те, що для всіх оцінених параметрів спостерігається тільки нейротоксичність та карциногенність, що, вірогідно, підтверджує попередній прогноз, а саме вплив на кінази та метаболітотронний ГАМК-рецептор. Інша токсична дія для сполук не прогнозується, що свідчить про потенційно безпечний фармакологічний профіль.

Більшість досліджуваних сполук відповідають критеріям «drug-like»: MW (Da) (< 500), n-HBA (< 10), n-HBD ( $\leq 5$ ), TPSA (< 140 Å<sup>2</sup>) та logP ( $\leq 5$ ) (табл. 2). Задовільне значення TPSA (> 140 Å<sup>2</sup>) для сполук також добре корелює з пасивним молекулярним

**XXIII Всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань сучасної хімії, Дніпро, 19-22 травня 2025 р.**

транспортном через мембрани. Тобто досліджувані сполуки матимуть високу здатність проникати через гематоенцефалічний бар'єр та гнучко взаємодіяти з молекулярними мішенями. Важливо, що досліджувані сполуки також відповідають критеріям «drug-like» за всіма фільтрами (Lipinski (Pfizer) filter, Veber (GSK) filter, Muegge (Bayer) filter, Ghose filter, Egan filter), які широко використовуються при розробці лікарських засобів.

Таблиця 2. Прогнозована токсичність для 3-метил-(феніл-)-бензо[*f*]-[1,2,4]триазино[2,3-*d*][1,4]діазепін-2,7(6*H*,8*H*)-діонів

Сполуки	Пероральне застосування			Прогнозована токсичність, ймовірність від 1**						
	Клас токсичності*	ЛД <sub>50</sub> , мг/кг	Точність прогнозу, %	ГТ	НТ	НФТ	КТ	КГ	МГ	ЦТ
<b>2.1</b>	IV	562	54.26	0.56 /ні	0.84 /так	0.77 /ні	0.88 /ні	0.60 /так	0.61 /ні	0.72 /ні
<b>2.2</b>	IV	750	67.38	0.54 /ні	0.88 /так	0.76 /ні	0.90 /ні	0.59 /так	0.64 /ні	0.71 /ні

\* – Класи токсичності визначені відповідно до узгодженої на глобальному рівні системи класифікації та маркування хімічних речовин (GHS). Значення ЛД<sub>50</sub> наведені в мг/кг для перорального застосування: клас I: смертельно небезпечні (ЛД<sub>50</sub> ≤ 5); клас II: смертельно небезпечні (5 < ЛД<sub>50</sub> ≤ 50); клас III: токсичні (50 < ЛД<sub>50</sub> ≤ 300); клас IV: шкідливі (300 < ЛД<sub>50</sub> ≤ 2000); клас V: можуть бути шкідливими (2000 < ЛД<sub>50</sub> ≤ 5000) та клас VI: нетоксичні (ЛД<sub>50</sub> > 5000).

\*\* – ГТ-гепатотоксичність; НТ-нейротоксичність; НФТ-нефротоксичність; КТ-кардіотоксичність; КГ-карциногенність; МГ-мутагенність; ЦТ-цитотоксичність

**XXIII Всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань сучасної хімії, Дніпро, 19-22 травня 2025 р.**

Таблиця 2. Фізико-хімічні дескриптори та фармакокінетичні властивості досліджуваних сполук згідно даних SwissADME.

Фізико-хімічні дескриптори та прогнозовані фармакокінетичні властивості*	Сполуки	
	1.1	1.2
MW (Da) (< 500)	242.23	304.30
n-ROTB (< 10)	0	1
n-HBA (< 10)	4	5
n-HBD ( $\leq 5$ )	1	1
TPSA (< 140, Å <sup>2</sup> )	76.88	76.88
logP ( $\leq 5$ )	0.76	2.06
Molar refractivity	68.28	88.75
Gastrointestinal absorption	high	high
<b>Druglikeness</b>		
Lipinski (Pfizer) filter [44]	yes	yes
Veber (GSK) filter [45]	yes	yes
Muegge (Bayer) filter [46]	yes	yes
Ghose filter [47]	yes	yes
Egan filter [48]	yes	yes
Bioavailability Score [49]	0.55	0.55
Lead-likeness	No; 1 violation: MW<250	no

\* – MW: molecular weight, n-ROTB: number of rotatable bonds, n-HBA: number of hydrogen bond acceptors, n-HBD: number of hydrogen bonds donors, TPSA: topological polar surface area.

Таким чином, проведені *in silico* біологічні дослідження 3-R-бензо[*f*][1,2,4]тріазино[2,3-*d*][1,4]діазепін-2,7(6H,8H)-діонів показали, що даний клас сполук є перспективним у плані фармакологічних досліджень та потребує розробки методик синтезу.

Література

1. Muhammad A. Rashid, Aisha Ashraf, Sahibzada S. Rehman, Shaukat A. Shahid, Adeel Mahmood and Muhammad Faruq (2019). 1,4-Diazepines: A Review on Synthesis, Reactions and Biological Significance. *Current Organic Synthesis*, 16(5): 709 – 729. <https://doi.org/10.2174/1570179416666190703113807>.
2. R. Ramajayam, Rajani Girdhar, M. R. Yadav (2007). Current Scenario of 1,4-Diazepines as Potent Biomolecules-A Mini Review. *Mini Reviews in Medicinal Chemistry*, 7(8): 793 – 812. <https://doi.org/10.2174/138955707781387876>.
3. Kaur Gill Rupinder, Om Kaushik Shiv, Chugh Jasreen, Bansal Sumit, Shah Anamik, Bariwal Jitender (2014). Recent Development in [1,4]Benzodiazepines as Potent Anticancer Agents: A Review. *Mini Reviews in Medicinal Chemistry*, 14(3): 229-256.
4. Pranshu Bhardwaj, Navjeet Kaur (2022). Palladium-Catalyzed C-N Coupling in the Synthesis of 1,4-Benzodiazepines Fused with 5-Membered Carbo- and Heterocycles. *Current Organic Chemistry*, 26 (20): 1827 – 1847. <https://doi.org/10.2174/1385272827666221229104724>.
5. Muylaert Koen, Jatczak Martyna, Mangelinckx Sven, V. Stevens Christian (2016). Synthesis of Pyrido-annelated Diazepines, Oxazepines and Thiazepines. *Current Medicinal Chemistry*, 23 (42): 4784-4823.
6. [http://www.swisstargetprediction.ch/result.php?job=1182670851&organism=Homo\\_sapiens](http://www.swisstargetprediction.ch/result.php?job=1182670851&organism=Homo_sapiens)
7. Banerjee P, Kemmler E, Dunkel M, Preissner R. ProTox 3.0: a webserver for the prediction of toxicity of chemicals. *Nucleic Acids Res* **2024**, 52, W440-W445.
8. Daina A, Michielin O, Zoete V. SwissADME: a free web tool to evaluate pharmacokinetics, drug-likeness and medicinal chemistry friendliness of small molecules. *Scientific Reports* 2017;7(1). <https://doi.org/10.1038/srep42717>.

**МЕХАНІЗМ ПІРАМІДАЛЬНОЇ ІНВЕРСІЇ АТОМА АЗОТУ В 1-АРИЛАЗИРИДИНАХ. АНАЛІЗ ВПЛИВУ ЗАМІСНИКІВ В АРОМАТИЧНОМУ КІЛЬЦІ ТА ВНУТРІШНЬО МОЛЕКУЛЯРНИХ ВЗАЄМОДІЙ НА ПЕРЕВАЖНІ КОНФОРМАЦІЇ ТА БАР'ЄРИ ІНВЕРСІЇ АТОМІВ АЗОТУ**

Ліб О.С., Просяник О.В., Куцик-Савченко Н.В., Лебідь О.С., Кисельов В.В., Янова К.В., Харченко О.В

Український державний університет науки і технологій,  
м. Дніпро, пр. Науки, 8

Дослідження пірамідальної інверсії атома азоту в 1-арилазиридинах є достатньо складним завданням, оскільки, по-перше, ароматичне кільце, з теоретичних міркувань, має амбідентну природу, так як, через наявність зайнятої  $\pi$ -молекулярної орбіталі (МО) ароматичного кільця ( $\pi_{Ar}$ ), воно а priori може бути ефективним донором  $\pi$ -електронів, особливо за присутності в ньому електронодонорних замісників, і може бути нуклеофілом, здатним взаємодіяти з електрофільними розпушуючими МО. По-друге, завдяки присутності в ароматичному кільці розпушуючої  $\pi$ -МО ( $\pi^*_{Ar}$ ), воно є акцептором  $\pi$ -електронів, і може бути, особливо за присутності електроноакцепторних замісників, ефективним електрофілом здатним взаємодіяти з вільною парою електронів атома азоту. По-третє, замісники в ароматичному кільці можуть мати електронодонорні чи електроноакцепторні властивості. По-четверте, мінімумом енергії в основному стані 1-арилазиридинів теоретично повинні володіти дві конформації: бісекторна та перпендикулярна.

За останні десятиріччя, завдяки відносній доступності значної кількості об'єктів для дослідження, велика увага була присвячена вивченню впливу замісників в ароматичному кільці на процеси термічної топомеризації різноманітних арилімінів. Однак при цьому головною метою більшості робіт було встановлення механізму обертального чи інверсійного механізму топомеризації арилімінів, а не дослідження власне механізму планарної інверсії атома азоту і його залежності від замісників в ароматичному кільці, яка так і залишилася невизначеною. На відміну від арилімінів, у випадку арилазиридинів маємо беззаперечне дослідження саме процесу пірамідальної інверсії атома азоту і впливу замісників в ароматичному кільці на нього. Слід зазначити, що, на відміну від процесів термічної топомеризації арилімінів, пірамідальна інверсія в 1-арилазиридинах практично не досліджена, і до цих пір фактично є terra incognita. Аналіз бар'єрів інверсії атомів азоту у диметилітилових естерах 1-арилазиридин-2,2-дикарбонових кислот чітко свідчить, що присутність електронодонорного замісника в пара-положенні ароматичного кільця по відношенню до атома азоту азиридину призводить до відчутного зростання бар'єру інверсії атома азоту порівняно з 1-фенілазиридином. Присутність навіть такого помірної донора електронів, як метильна група в 1-п-толілазиридині призводить до збільшення бар'єру інверсії атома азоту на 1,3 кДж/моль, тоді як за присутності більш сильного  $\pi$ -електронодонорного замісника — бутоксильної групи, бар'єр інверсії атома азоту зростає на 4,3 кДж/моль. Натомість, присутність електроноакцепторних замісників в

*XXIII Всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань сучасної хімії, Дніпро, 19-22 травня 2025 р.*

п--положені ароматичного кільця призводить до суттєвого зменшення бар'єру інверсії атому азота навіть за присутності такого помірною акцептора електронів, як метоксикарбонільна група, бар'єр інверсії атому азоту зменшується на 6,3 кДж/моль. В той же час, за присутності метоксикарбонільної групи навіть у мета-положенні ароматичного кільця, коли неможливе пряме полярне супряження замісника з атомом азоту, що інвертує, бар'єр інверсії зменшується на 1,8 кДж/моль. Більш того, присутність в ароматичному кільці двох чи навіть трьох метильних груп в положеннях 2, 4, 6 призводить не до збільшення, а до зменшення бар'єрів інверсії атомів азоту на 5,3 кДж/моль порівняно з 1-(пара-толіл) азиридином. Окрім того, присутність будь-якого замісника в орто-положенні, незалежно від його природи, призводить до зменшення бар'єрів інверсії, порівняно з азиридинами, в яких цей же замісник знаходиться в пара-положенні ароматичного кільця. Окремо слід зазначити, що стеричний вплив замісників на зменшення бар'єрів інверсії атомів азоту узгоджується зі зменшенням конформаційної енергії замісників в ряду  $Me > Br$ , тобто чим більшою є конформаційна енергія замісника, тим більший його вплив на зменшення бар'єру інверсії атому азоту. З теоретичної точки зору основні конформації 1-арилазиридин-2,2-дикарбонових естерів а ргіогі повинні стабілізуватись за рахунок двох основних взаємопов'язаних внутрішньомолекулярних взаємодій: бісекторна конформація – за рахунок взаємодії  $\pi_{Ar} \rightarrow \sigma^*_{N-C_2}$ , а перпендикулярна –  $n_p N \rightarrow \pi^*_{Ar}$ . При цьому вплив замісників в ароматичному кільці на енергію цих взаємодій може бути протилежним і неоднозначним.

Бар'єри інверсії атому азота суттєво - до 10,6 кДж/моль - різняться між собою і залежать від замісника та його положення в ароматичному кільці, що обумовлено різними ефективними конформаціями 1- арилазиридинів в основних та перехідних станах інверсії атому азоту і відповідною зміною в кожній із конформацій домінуючих внутрішньомолекулярних взаємодій: в основних станах 1-арилазиридини знаходяться переважно або виключно в бісекторній чи близькій до неї конформації, що стабілізується взаємодією  $\pi_{Ar} \rightarrow \sigma^*_{N-C_2}$ , енергія якої зростає за присутності електронодонорних замісників в ароматичному кільці, внаслідок підвищення енергії МО  $\pi_{Ar}$  і відповідного зменшення енергетичної щільності між МО, що взаємодіють. В той же час перехідний стан інверсії вимагає утворення перпендикулярної конформації, що стабілізується взаємодією  $(nN \rightarrow \pi^*_{-Ar})$ , енергія якої зростає за присутності електроноакцепторних замісників в ароматичному кільці внаслідок зменшення енергії МО  $\pi^*_{-Ar}$  і відповідного зменшення енергетичної щільності між МО, що взаємодіють.

Відповідно всі розглянуті вище випадки зменшення бар'єрів інверсії атомів азоту пояснюються частковим переведенням ароматичного кільця з бісекторної конформації основного стану в перпендикулярну конформацію перехідного стану за рахунок стеричного відштовхування між орто-замісником і навіть мета-замісником в ароматичному кільці і азиридиновим циклом, тому стає непотрібною додаткова енергія для подолання енергії взаємодії  $\pi_{Ar} \rightarrow \sigma^*_{N-C_2}$  при переході з бісекторної конформації в перпендикулярну. Відповідно всі взаємодії, що дестабілізують бісекторну конформацію, поряд з неможливістю утворення в основних станах з просторових

*XXIII Всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань сучасної хімії, Дніпро, 19-22 травня 2025 р.*

причин бісекторної конформації, як у розглянутих вище випадках, призводять до зменшення бар'єрів інверсії атому азоту і навпаки.

Встановлено двостадійний комбінований механізм інверсії атомів азоту в 1-арилазиридинах. Присутність сильної кореляції  $I_{gk_{298K}}$  з  $\sigma_p^+$  – константами замісників, що характеризують пряме полярне супряження з електроноакцепторним перехідним станом свідчить, що в процесі інверсії електрофілами є МО  $\sigma^*N-C_2$  та  $\pi^*Ar$ , що вказує на нуклеофільність ароматичного кільця і свідчить про реалізацію бісекторної конформації 1-арилазиридинів в основному стані. Присутність в ароматичному кільці електронодонорних замісників стабілізує бісекторну конформацію. В той же час наявність кореляції значень  $I_{gk_{298K}}$  з  $\sigma_p^-$  – константами, що характеризують пряме полярне супряження з електронодонорним перехідним станом вказує на електрофільні властивості  $\pi$ -системи ароматичного кільця при взаємодії з нуклеофілом, яким є вільна електронна пара атома азоту (nN). Встановлено, що в процесі пірамідальної інверсії атома азоту ароматичне кільце виявляє амбідентну природу, оскільки воно водночас володіє як  $\pi$ -електронодонорними -МО ( $\pi-Ar$  МО) і є ефективним нуклеофілом, так і  $\pi$ -електроноакцепторними вакантними ( $\pi^*$ -МО) і є ефективним електрофілом. Електронні властивості замісників в ароматичному кільці мають критичний вплив на будову, ефективні конформації та бар'єри інверсії атомів азоту 1-арилазиридинів: присутність електронодонорних замісників в ароматичному кільці сприяє утворенню бісекторної конформації, в якій площини ароматичного кільця і азиридинового циклу знаходяться в ортогональних положеннях, і зростанню бар'єрів інверсії атомів азоту. Натомість, присутність електроноакцепторних замісників в ароматичному кільці, як і зростання просторового напруження в молекулі через присутність замісників в орто-положенні ароматичного кільця до атома азоту азиридину, так і збільшення їх конформаційних енергій або неможливість реалізації з просторових причин бісекторної конформації. сприяє утворенню перпендикулярної конформації, в якій ароматичне кільце і азиридиновий цикл знаходяться в одній площині, і зменшенню бар'єрів інверсії атомів азоту. З огляду на просторову несумісність бісекторної і перпендикулярної конформацій в дійсності молекули 1-арилазиридинів в основних і перехідних станах інверсії знаходяться в проміжних спотворених конформаціях. При цьому у всіх випадках двограний кут  $\phi$  між площинами азиридинового та ароматичного циклів вочевидь знаходиться в межах від  $0^\circ$  до  $90^\circ$ . В цілому бар'єри інверсії атомів азоту залежать від двограного кута  $\phi$  і синхронно змінюються з ним по синусоїді, тобто зменшуються з його зменшенням і мають мінімальні значення при  $\phi = 0^\circ$  та зростають з його збільшенням і досягають максимальних призначень при  $\phi = 90^\circ$ . Нуклеофільні властивості замісників мають домінуючий вплив на бар'єри інверсії атомів азоту, в кожному окремому випадку в основних і перехідних станах інверсії атома азоту реалізуються різні спотворені конформації з певним внеском тієї чи іншої конформації. При цьому в основному стані переважною є бісекторна конформація з певним внеском перпендикулярної конформації. тоді як в перехідному стані навпаки – перпендикулярна з певним внеском бісекторної конформації. На базі обширних експериментальних даних з бар'єрів пірамідальної інверсії атомів азоту проведено їх докладний аналіз, встановлено взаємозв'язок між електронною природою замісників у ароматичному кільці, ефективними конформаціями молекул та бар'єрами інверсії атомів азоту, запропонована модифікація правила Бента щодо впливу внутрішньомолекулярних взаємодій на бар'єри інверсії атомів азоту.

Завдяки амбідентній природі ароматичного кільця, оскільки воно водночас володіє як зайнятими  $\pi$ -електронами електронодонорними  $\pi$ -МО ( $\pi-Ar$ ) і є

*XXIII Всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань сучасної хімії, Дніпро, 19-22 травня 2025 р.*

ефективним нуклеофілом, так і  $\pi$  розпушуючими електроноакцепторними вакантними ( $\pi^*$ -МО) і є ефективним електрофілом, електроні властивості замісників в ароматичному кільці, мають критичний вплив на будову, ефективні конформації та бар'єри-інверсії атомів азоту 1- арилазиридинів. Присутність електронодонорного замісника в ароматичному кільці сприяє утворенню бісекторної конформації, в якій площини ароматичного кільця і азиридинового циклу знаходяться в ортогональних положеннях і зростанню бар'єрів інверсії атомів азоту. Натомість, присутність електроноакцепторного замісника в ароматичному кільці, як і зростання просторового напруження в молекулі через присутність будь-яких замісників в орто-положенні ароматичного кільця до атома азоту азиридину, так і збільшення їх конформаційних енергій або неможливість реалізації з просторових причин бісекторної конформації сприяє утворенню перпендикулярної конформації, в якій ароматичне кільце і азиридиновий цикл знаходяться в одній площині, і зменшенню бар'єрів інверсії атомів азоту. З огляду на просторову несумісність бісекторної і перпендикулярної конформацій в дійсності молекули 1- арилазиридинів в основних і перехідних станах інверсії знаходяться в проміжних скошених конформаціях. В цілому процес інверсії атому азоту в 1-арилазиридинах має комплексний механізм, що складається з двох різних послідовних процесів і водночас має два різні перехідні стани; в процесі інверсії водночас здійснюються наступні енерговитратні процеси — обертання навколо зв'язку N–Ar з утворенням відповідного електронодонорного перехідного стану обертання і подолання енергії взаємодії  $\pi\text{Ar} \rightarrow \sigma^*\text{N-C}$  (тобто перехід з квазіенантімерної бісекторної конформації в перпендикулярну, цей перехід супроводжується зростанням енергії взаємодії ( $n\text{N} \rightarrow \pi^*\text{-Ar}$ ); саме в цій конформації і відбувається власне інверсія атома азоту (перехід ВЕП атома азоту з первинного  $sp^3$ -гібридного стану в проміжний 100%-вий  $2p_z$ -стан в з одночасною зміною гібридизації атома азоту з  $sp^3$ -в  $sp^2$ -гібридний стан). Після інверсії атом азоту з набутого нового  $sp^2$ -гібридного стану, регібридується в більш енергетично вигідний  $sp^3$ -гібридний стан і арилазиридин набуває дзеркальну до вихідної квазіенантімерну конформацію, що ініціює аналогічні перетворення, а далі процес повторюється, тобто реалізується вічний молекулярний двигун в якому рушійною силою є атом азоту, що інвертує, а лопаттю двигуна — арильна група. Присутність карбоксильних груп дозволяє прикріплювати до молекули мотора корисний вантаж у вигляді біологічно активних сполук, що переміщуються по судинам організму.

**МОДИФІКАЦІЯ ПРАВИЛА БЕНТА ЩОДО ВПЛИВУ  
ВНУТРІШНЬО МОЛЕКУЛЯРНИХ ВЗАЄМОДІЙ НА БАР'ЄРИ  
ІНВЕРСІЇ АТОМІВ АЗОТУ**

Просяник О.В., Ліб О.С., Куцик-Савченко Н.В., Лебідь О.С., , Кисельов  
В.В., Янова К.В., Харченко О.В.

Український державний університет науки і технологій,  
м. Дніпро, пр. Науки, 8

Публікація фундаментальної роботи лауреата Нобелівської премії з хімії Ж. М. Лена J. M. Lehn "Nitrogen inversion", Topics in Current cytmistry, B.15, Neft 3, S 311 (1970) викликала зливу статей присвячених вивченню інверсії атома азоту, які ґрунтувались на базових теоретичних положеннях і постулатах викладених у вказаній роботі, а саме: інверсія являє собою  $sp^n \rightarrow p$  перехід вільної пари електронів атома азоту (ВЕР); відповідно ефекти, що збільшують s-характер ВЕР в основному стані, такі як зростання електронегативності змісника біля атома азоту, стеричний ефект напруження циклу, що включає в себе внутрішнє кутове Байєрівське напруження, скручуюче Пітцерівське та трансанулярне (кільцеве напруження циклу) збільшують бар'єри інверсії і, навпаки, ефекти, що збільшують p-характер ВЕР в основному стані ( супряження , розкриття валентного кута атома азоту), зростання стеричного відштовхування між замісником біля атома азоту і замісниками в азиридиновому циклі - зменшують бар'єри інверсії атома азоту. Попри велику кількість статей, присвячених дослідженню інверсії атома азоту, до сих пір відсутнє їх узагальнення і пояснення, відсутні чіткі відповіді на ряд важливих питань: чому присутність електроноакцепторних замісників біля атома азоту, як і введення останнього в тричлений цикл, різко збільшують конфігураційну стійкість і бар'єри інверсії атомів азоту, чи існують інші чинники, окрім зазначених вище, які підвищують конфігураційну стійкість атома азоту. Залишається нез'ясованим існування (2p-3dS)-  $\pi$  -супряження в системі зв'язків N-S, незалежно від ступеню окиснення атома сірки. З метою отримання відповіді на ці та інші нагальні питання на основі узагальнення літературних даних ми спробували підвести деякі проміжні підсумки. В роботі нами проведено докладний аналіз обширних експериментальних, теоретичних та розрахункових і квантово-хімічних досліджень даних з бар'єрів інверсії атомів азоту. Оскільки більшість розглянутих робіт узгоджується з правилом Бенга, ми виклали наші погляди у вигляді трансформації цього правила, яке, з нашої точки зору,

найкраще відтворює будову органічних сполук і має широку застосовність, зокрема при аналізі геометрії органічних сполук, в залежності від внутрішньомолекулярних взаємодій: “У сполуках елементів 2-го періоду s-характер концентрується переважно у напрямку електропозитивного елемента, а р-характер — електронегативного замісника”.

Сформульовано модифіковане правило Бента для азотвмісних сполук щодо впливу внутрішньо молекулярних взаємодій на бар'єри інверсії атомів азоту. Його слід формулювати: “при збільшенні електронегативності замісника X біля атому азоту s-характер концентрується на його вільній електронній парі (ВЕП), як на зв'язку з найбільш електропозитивним елементом, а р-характер — на електронегативному зв'язку N-X. У випадку утворення зв'язку з електронегативним атомом, атомна орбіталь, яка задається атомом X цього зв'язку, зі зростанням електронегативності атома X набирає більшого ступеня р-характеру, а ВЕП атома азоту-- більшого ступеня s-характеру, що призводить до зростання бар'єру інверсії, оскільки бар'єри інверсії атомів азоту зростають зі збільшенням s-характеру ВЕП атома азоту та електронегативності замісників біля атома азоту. У більш загальному випадку бар'єри інверсії атомів азоту, зростають зі зменшенням р-складової ВЕП атома азоту і збільшенням s-характеру ВЕП та електронегативності атома X і енергій внутрішньомолекулярних взаємодій (ВМВ) типу  $nN \rightarrow \sigma^*N-X$  і будь-яких ВМВ за участі МО  $nN$ , які призводять до збільшення s-характеру ВЕП атома азоту. Це взаємодії МО ВЕП  $nN$ , як з  $\sigma$ -розпушуючими МО, не лише прилеглих до атома азоту  $\sigma$ -зв'язків  $nN \rightarrow \sigma^*N-X \rightarrow \sigma^*N-X$ , а також і з груповими розпушуючими орбіталями  $\pi$ - типу  $\pi^*CY_2$  наприклад,  $nN \rightarrow \pi^*CH_2$  азиридинового циклу, метиленової, метильної чи бензильної груп, що призводять до збільшення s- характеру ВЕП атома азоту; так і з  $\sigma$ -розпушуючими МО віддалених  $\sigma$ -зав'язків, наприклад, ВМВ  $nN \rightarrow \sigma^*C-F_2$  (у випадку 2,2-дифторазиридину розрахунковий бар'єр інверсії становить 51,21 кДж /мол, що є одним з найвищих відомих бар'єрів інверсії, при цьому s- характер ВЕП атому азоту сягає 58,8%, що чудово узгоджується з модифікованим правилом Бента, тим більше коли біля атома азоту відсутній електронегативний замісник. Зростання р-характеру ВЕП атому азоту внаслідок будь-яких внутрішньомолекулярних взаємодій:  $nN \rightarrow \pi^*C=O \rightarrow \sigma$  або:  $nN- \pi^*Ar$  призводить до зменшення бар'єрів інверсії атомів азоту.

**О-АМІНОБЕНЗОНІТРИЛ У СИНТЕЗІ  
2-R-[1,2,4]-ТРИАЗОЛО[1,5-с]ХІНАЗОЛІНІВ**

Романовська А.О., Коптева С.Д., Коваленко С.І.

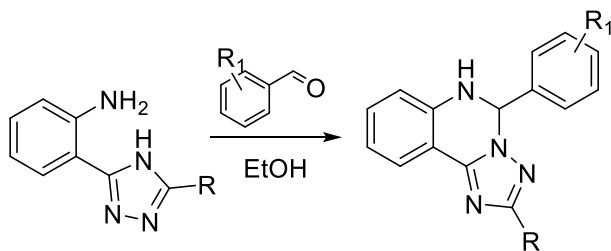
Дніпровський національний університет ім. Олеса Гончара,  
м. Дніпро, проспект Науки 72

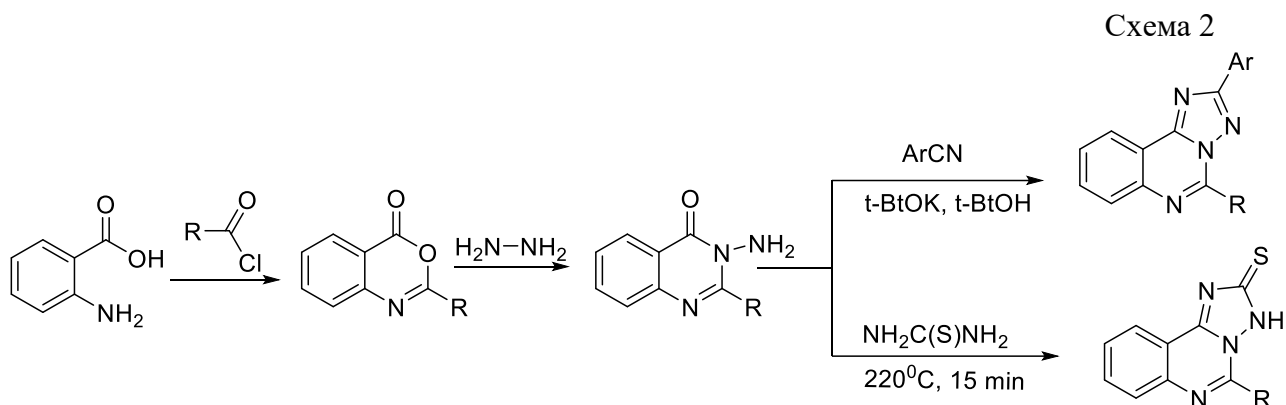
Похідні хіназоліну, а саме 4-анілінохіназоліни, ефективний клас протипухлинних лікарських засобів, які на сьогодні застосовуються у медичній практиці для лікування різноманітних форм раку. Окрім того, хіназоліни проявляють широкий спектр біологічної активності, протизапальну, антигіпертензивну, антимікробну, протисудомну, протидіабетичну та іншу, що вказує на їх подальшу перспективність у плані пошуку нових кандидатів у ліки. Похідні триазолу також є важливою групою гетероциклічних сполук з широким спектром практичного застосування в фармацевтичній промисловості (як протигрибкові, противірусні, антибактеріальні, протизапальні та протитуберкульозні засоби). Поєднання хіназолінового та триазольного каркасу в одній молекулі розкриває подальшу перспективу пошуку нових сполук здатних проявляти різноманітну біологічну активність. Тим більш, що серед триазолохіназолінів уже знайдені сполуки, що проявляють протиревматичну та антианафілактичну активність, антигіпертензивну та нейростимулюючу активність, вони володіють протизапальною, противірусною, протигрибковою, антимікробною, антибактеріальною, антиоксидантною, протисудомною дією, є антагоністами аденозинових рецепторів та сполуками із значною цитотоксичною дією [1]. Біологічна активність заміщених [1,2,4]триазоло[с]хіназолінів є широко досліджуваною, ці сполуки ефективно інгібують ріст ракових клітин різних типів, проявляють протимікробну активність щодо багатьох бактерій і грибків, а також пригнічують ферменти запалення, такі як циклооксигеназа-2 [2-6]. Наразі, [1,2,4]триазоло[с]хіназоліни є перспективними об'єктами дослідження через значний їх біологічний потенціал, а розробка простих та екологічних методів їх синтезу із комерційно доступних речовин є актуальним завданням.

Серед сучасних методів синтезу виділяють кілька основних підходів до формування [1,2,4]триазоло[1,5-с]хіназолінового циклу. По-перше, 2,5-дизаміщені [1,2,4]триазоло[1,5-с]хіназоліни можуть бути отримані з відповідних 2-(5-R-1,2,4-триазол-3-іл)анілінів шляхом конденсації з ароматичними альдегідами [1] (схема 1).

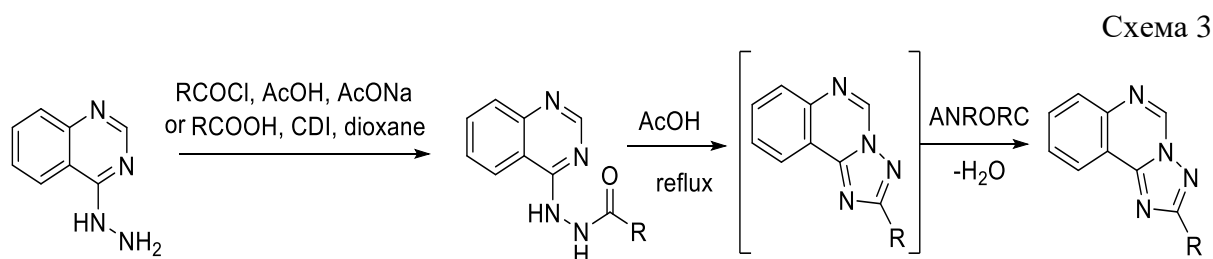
По-друге, відомий метод формування триазолохіназолінової системи шляхом анелювання триазольного циклу до хіназолінового каркасу. Метод заснований на синтезі 3-аміно-2-R-хіназолон-4(3H)-онів через відповідні 2-R-4H-бензо[*d*][1,3]оксазин-4-они з антранілової кислоти [1] (схема 2). Взаємодія 3-аміно-2-R-хіназолон-4(3H)-онів з арилнітрилами або тіосечовинами приводить цільових продуктів з задовільними виходами.

Схема 1

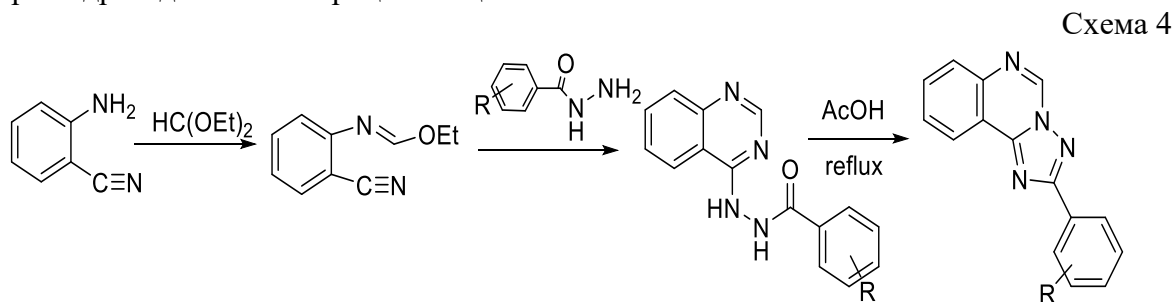




Інший підхід до синтезу 2-R-[1,2,4]триазоло[1,5-с]хіназолінів заснований на гетероциклізації (3*H*-хіназолін-4-ілден)гідразидів карбонових кислот в оцтовій кислоті (схема 3). Останні формують з 4-гідразінохіназоліну та активованих карбонових кислот.

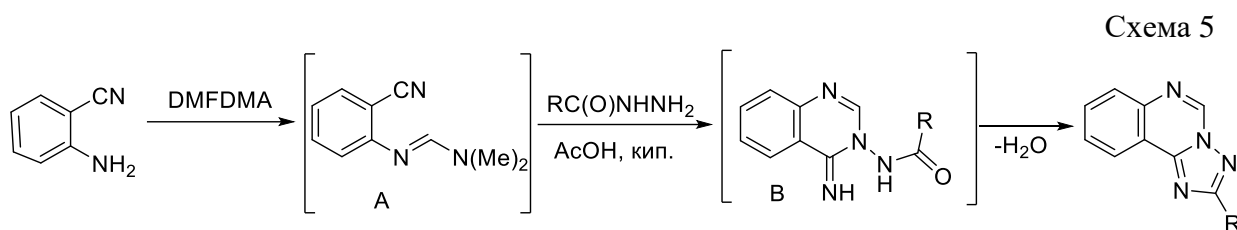


2-R-[1,2,4]триазоло[1,5-с]хіназоліни також можуть бути синтезовані з комерційно доступного 2-амінобензонітрилу [4] (схема 4). Метод включає декілька стадій, синтез етил *N*-(2-ціанофеніл)форміміду, формування *N'*-(хіназолін-4-іл)арилгідразидів та їх гетероциклізацію.



Кожен із запропонованих вище методів має ряд недоліків: багатостадійність, а отже незначні виходи цільових продуктів, використання комерційно недоступних реагентів тощо.

Наразі, 2-амінобензонітрил, як комерційно доступна вихідна речовина, привернув нашу увагу та був досліджений у синтезі 2-R-[1,2,4]триазоло[1,5-с]хіназолінів. Метод включав тандемне формування обох кілець у межах одного реакційного циклу («*one-pot*» метод). При цьому вихідна сполука при взаємодії з *N,N*-диметилформамідом диметилацеталем (DMF-DMA) кількісно утворює проміжний *N'*-(2-ціанофеніл)-*N,N*-диметилформімідамід (А). Після відгонки надлишку реагентів та розчинника, без додаткової ізоляції проміжної сполуки, при взаємодії останньої з гідрازیдами алкіл-(арил-, гетерил-)карбонових кислот в оцтовій кислоті, утворюються цільові 2-заміщені [1,2,4]триазоло[1,5-с]хіназоліни (схема 5).



Запропонована нами методика дозволяє ефективно синтезувати цільові сполуки з високим виходом (60-92%). Використання двостадійного безперервного синтезу («one-pot») спрощує процес. Очищення продуктів проводили шляхом упарювання розчинника під вакуумом з наступною перекристалізацією з метанолу. Індивідуальність сполук підтверджено ТШХ, а їх структура — ЯМР  $^1\text{H}$  та  $^{13}\text{C}$ -спектроскопією. Отже, перевагою методу є скорочення тривалості синтезу, мінімізація витрат реагентів та регіоселективність. У ряді випадків спостерігалось утворення незначної кількості побічних продуктів, що вимагає подальшої оптимізації умов синтезу.

Таким чином, синтетичні методи одержання похідних 2-R-[1,2,4]триазоло[с]хіназолінів продовжують активно розвиватися. Особливу перспективу становлять «one-pot» методи, що поєднують ефективність, високу селективність і можливість масштабування синтезу без додаткових етапів очищення.

Список літератури:

1. Aslam S., Jabeen T., Ahmad M., Haq A., Al-Hussain S. A., Zaki M. E.A. Triazoloquinazoline: Synthetic Strategies and Medicinal Importance. – 2023. DOI: <http://dx.doi.org/10.5772/intechopen.1001898>.
2. Banerji, A. Recent advances in the pharmacological diversification of triazole-substituted quinazoline hybrids as anticancer agents. // *Current Medicinal Chemistry*. – 2022. V. 29, № 9. – p. 1583–1601. DOI: 10.1039/d0ra06642g
3. Patel S. Synthesis and biological evaluation of novel [1,2,4]triazolo[1,5-c]quinazoline derivatives as potential antimicrobial agents. // *Bioorg. Med. Chem. Lett.* – 2021. V. 31, № 5. - p. 3549-3553. DOI: <https://doi.org/10.1002/jhet.2979>
4. Kovalenko S.I., Antypenko L.M., Bilyi A.K., Kholodnyak S.V., Karpenko O.V., Antypenko O.M. Synthesis and anticancer activity of 2-(alkyl-, alkaryl-, aryl-, hetaryl-)-[1, 2, 4] triazolo [1, 5-c] quinazolines. // *Scientia Pharmaceutica*. – 2013. V. 81. – p. 359-392. DOI: 10.3797/scipharm.1211-08
5. Zayed M. F. Medicinal Chemistry of Quinazolines as Anticancer Agents Targeting Tyrosine Kinases.// *Sci. Pharm.* – 2023. V.91, № 2. - p.18. DOI: <https://doi.org/10.3390/scipharm91020018>
6. Zhang Y., Chen L., Xu H., Li X., Zhao L., Wang W., Li B., Zhang X. 6,7-Dimorpholinoalkoxy quinazoline derivatives as potent EGFR inhibitors with enhanced antiproliferative activities against tumor cells.// *European Journal of Medicinal Chemistry*. – 2018. V.147, p. 77-89. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ejmech.2018.01.090>

**ДОСЛІДЖЕННЯ ЦИТОТОКСИЧНОЇ ДІЇ ДЕЯКИХ 2-R-БЕНЗО[e]-  
[1,2,4]ТРИАЗОЛО[1,5-c][1,2,3]ТРИАЗИНІВ З ВИКОРИСТАННЯМ  
IN SILICO ТА IN VITRO МЕТОДОЛОГІЇ**

Синявський С.В., Коптева С. Д., Воскобойнік О. Ю.

Дніпровський національний університет ім. Олеса Гончара,  
м. Дніпро, проспект Науки 72

Не дивлячись на значні успіхи хіміотерапії у лікуванні раку, щороку помітно знижується чутливість ракових клітин до існуючих лікарських засобів, формуються різноманітні механізми резистентності. Результатом цього є виникнення резистентних форм раку, і як наслідок, серйозні проблеми для здоров'я пацієнтів, підвищення захворюваності та смертності, збільшення тривалості перебування в лікарні та значного економічного тягаря у глобальному секторі охорони здоров'я. Наразі, широкий арсенал хіміотерапевтичних засобів, їх постійне поповнення новими напівсинте-тичними і синтетичними препаратами, не вирішує зазначену проблему, незважаючи на те, що дизайн та пошук протипухлинних агентів зазнав суттєвих змін. Отже, резистентність, складність та різноманітність механізмів розвитку є основним фактором, який спонукає науковців до розробки нових хіміотерапевтичних препаратів. При цьому, значна увага приділяється пошуку нових «малих» молекул (лігандів), які б були націлені на специфічні білки.

В цьому плані цікавими об'єктами є невідомі класи сполук, а саме 2-R-бензо[e][1,2,4]триазоло[1,5-c][1,2,3]триазини. Тим більш, що відомо ряд структурних аналогів даного гетероциклу, а саме заміщені тієно[3,2-d]-[1,2,3]триазини, які є інгібіторами рецептора судинного ендотеліального фактора росту-2 [1], заміщені бензотієно[3,2-d]1,2,3-триазин-4(3H)-они – антипроліферативні агенти щодо клітин HeLa [2], заміщені пірано[2,3-d]-[1,2,3]триазини – протипухлинні агенти проти раку печінки (лінія HEPG2) [3], заміщені піридо[3,2-d]1,2,3-триазини – інгібітори Pim-1 та

антипроліферативні агенти на клітини раку передміхурової залози (лінії LNCap та PC-3) [4], похідні піразоло[3,4-*d*][1,2,3]триазинів – протипухлинні агенти проти ліній ракових клітин (Huh-7, Panc-1 та CCRF) [5].

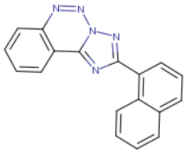
Отже, метою роботи є *in silico* біологічне дослідження деяких 2-*R*-бензо[*e*][1,2,4]триазоло[1,5-*c*][1,2,3]триазинів для обґрунтування необхідності їх *in vitro* дослідження на пухлинні та псевдо-нормальні клітинні лінії.

Результати прогнозування взаємодії 2-*R*-бензо[*e*][1,2,4]триазоло[1,5-*c*][1,2,3]триазинів до специфічних біологічних мішеней показали, що зазначені структури можуть впливати на різноманітні протеїнкінази (табл. 1). Наразі, більшість зазначених кіназ бере участь у таких процесах як проліферація клітин, диференціація, міграція, трансформація і запрограмована загибель клітин. Ампліфікація і мутації, які виникають у клітинах, є рушійними подіями в багатьох типах раку (недрібноклітинному раку легенів, гліобластомі, базально-подібний раку грудей тощо).

Таблиця 1

Результати прогнозу взаємодії деяких 2-*R*-бензо[*e*][1,2,4]триазоло[1,5-*c*]-[1,2,3]триазинів до протеїнкіназ згідно даних SwissTargetPrediction

Сполуки	Протеїнкінази	Абревіатура мішені	Відомі біоактивні речовини
	Рецептор фактора росту ендотелію судин 2	KDR	2
	Тирозин-протеїнкіназа SRC	SRC	3
	Тирозин-протеїнкіназа LCK	LCK	2
	Рецептор TGF-бета типу I	TGFBR1	2
	Серин/треонін-протеїнкіназа PLK1	PLK1	2
	Рибосомна протеїнкіназа S6 2	RPS6KB2	1
	c-Jun N-кінцева кіназа 1	MAPK8	3
	Глікогенсинтаза кіназа-3 бета	GSK3B	2
	Циклінзалежна кіназа 1	CDK1	5
	Рецептор епідермального фактора росту erbB1	EGFR	2

	Рецептор епідермального фактора росту erbB1	EGFR	8
	Рецептор фактора росту фібробластів 1	FGFR1	3
	Глікогенсинтаза кіназа-3 бета	GSK3B	5
	Бета-рецептор фактора росту тромбоцитів	PDGFRB	3
	Рецептор фактора росту тромбоцитів	PDGFRA PDGFRB	2

Наведені прогностичні результати дали можливість визначитися у напрямку досліджень, а саме вивченні 2-R-бензо[е][1,2,4]триазоло[1,5-с][1,2,3]триазинів на цитотоксичну дію щодо пухлинних клітин (MTT тест). В дослідженні були задіяні наступні клітинні лінії раку: гліобластоми людини (U251), потрійно-негативний рак грудної залози людини (MDA-MB-231), гострий Т клітинний лейкоз людини (Jurkat) та аденокарцинома кишківника людини (HCT-116). Результати досліджень показали, 2-(циклопропіл)-бензо[е][1,2,4]триазоло[1,5-с][1,2,3]триазин пригнічує ріст клітинних ліній Jurkat на 55,18%, 2-фенілбензо[е][1,2,4]триазоло[1,5-с][1,2,3]триазин пригнічує ріст клітинних ліній MDA-MB-231 та Jurkat на 9,81 та 44,71% відповідно. Тоді як, заміна фенільного замісника положення 2 на 1-нафтильний фрагмент приводить до втрати протипухлинної активності щодо зазначених клітинних ліній раку.

Таким чином, проведені *in silico* та *in vitro* біологічні дослідження 2-R-бензо[е][1,2,4]триазоло[1,5-с][1,2,3]триазинів показали, що даний клас сполук є перспективним у плані пошуку протипухлинних засобів, дослідження у даному напрямку продовжуються.

#### Література

1. Perspicace, E., Jouan-Hureau, V., Ragno, R., Ballante, F., Sartini, S., La Motta, C., Hesse, S. . (2013 ). Design, synthesis and biological evaluation of new classes of thieno 3,2-*d* pyrimidinone and thieno 1,2,3 triazine as inhibitor of vascular endothelial growth factor receptor-2

- (VEGFR-2). *European Journal of Medicinal Chemistry*, 63, 765-781. doi:10.1016/j.ejmech.2013.03.022
- Lauria, A., Alfio, A., Bonsignore, R., Gentile, C., Martorana, A., Gennaro, G. (2014). New benzothieno [3,2-d]-1,2,3-triazines with antiproliferative activity: Synthesis, spectroscopic studies, and biological activity. *Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters*, 24(15), 3291-3297. doi:10.1016/j.bmcl.2014.06.007
  - Ouf, N. H., Amr, A. E.-G. E., & Sakran, M. I. (2015). Anticancer activity of some newly synthesized pyrano 2,3-d 1,2,3 triazine derivatives using 1-(7-hydroxy-2,2-dimethylchroman-6-yl)ethanone as synthon. *Medicinal Chemistry Research*, 24(4), 1514-1526. doi:10.1007/s00044-014-1229-0
  - Y.-B. Fan , K. L., M. Huang , Y. Cao, Y.Li, S.-Y. Jin., W.-B. Liu a, J.-C. Wen ., D. Liu a, L.-X. Zhao. (2016). Design and synthesis of substituted pyrido[3,2-d]-1,2,3-triazines as potential Pim-1 inhibitors. *Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters*, 26(4), 1224-1228. doi:http://dx.doi.org/10.1016/j.bmcl.2016.01.032
  - Nasr, T., Bondock, S., Youns, M., Fayad, W., & Zaghary, W. (2017). Synthesis, antitumor evaluation and microarray study of some new pyrazolo 3,4-*d* 1,2,3 triazine derivatives. *European Journal of Medicinal Chemistry*, 141, 603-614. doi:10.1016/j.ejmech.2017.10.016
  - [http://www.swisstargetprediction.ch/result.php?job=1182670851&organism=Homo\\_sapien](http://www.swisstargetprediction.ch/result.php?job=1182670851&organism=Homo_sapien)
  - Ganot N., Meker S., Reytman L., Tzuberly A., Tshuva E. Y. (2013). Anticancer Metal Complexes: Synthesis and Cytotoxicity Evaluation by the MTT Assay. *J. Vis. Exp.* 81, e50767. doi:10.3791/50767.

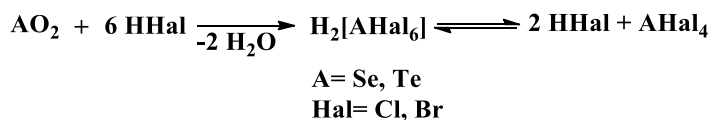
**ДОСЛІДЖЕННЯ РЕГІОСЕЛЕКТИВНОСТІ ЕЛЕКТРОФІЛЬНОЇ  
ВНУТРІШНЬОМОЛЕКУЛЯРНОЇ ГЕТЕРОЦИКЛІЗАЦІЇ 2-  
АЛКЕНІЛТІО-3-ЗАМІЩЕНИХ ХІНАЗОЛІН-4(3Н)-ОНІВ ПІД ДІЄЮ  
ТЕТРАГАЛОГЕНІДІВ СЕЛЕНУ ТА ТЕЛУРУ**

Кут Д.Ж., Кут М.М., Онисько М.Ю.  
Державний вищий навчальний заклад  
«Ужгородський національний університет»  
[diana.kut@uzhnu.edu.ua](mailto:diana.kut@uzhnu.edu.ua)

Хіназоліни та аналоги на його основі володіють широким спектром біологічної активності. Конденсовані похідні хіназоліну знаходять використання в синтезі фармацевтичних засобів та компонентів для органічної оптоелектроніки. В останні декілька років цікавість до похідних хіназолін-4-ону значно зріс, особливо у контексті розвитку нових методів синтезу та вивчення їх біоактивності. На даний час одним із найбільш перспективних та простих у виконанні методів синтезу таких гетероциклів є реакції електрофільної гетероциклізації алкеніл(алкініл)функціоналізованих хіназолін-4-онів. Основними електрофільними реагентами, які досліджуються в таких реакціях є галогени (бром, йод, бромід йоду та бромід хлору), однак використання халькогеновмісних електрофілів у літературі обмежене. Введення до складу хіназолінів тригалогенохалькогенового фрагмента може суттєво підвищити їхні цінні властивості, бо, як відомо, селен(телур)органічні сполуки зарекомендували себе як перспективні біоактивні речовини з різними фармакологічними властивостями. Тому дослідження регіоселективності реакцій халькогенування алкенільних тіоетерів хіназолін-4-ону та синтез гетероциклів на їх основі є актуальним і важливим завданням.

Вихідними об'єктами дослідження регіоселективності процесу реакцій гетероанелювання вибрано алкенільні тіоетери хіназолін-4-ону **1-8**. Тетрагалогеніди селену та телуру можна синтезувати із простих речовин,

так і одержати *in situ* із діоксиду халькогену та відповідної галогеноводневої кислоти, яка містить рівноважні кількості як безпосередньо вищезгаданих тетрагалогенідів, так і відповідних кислот Льюїса

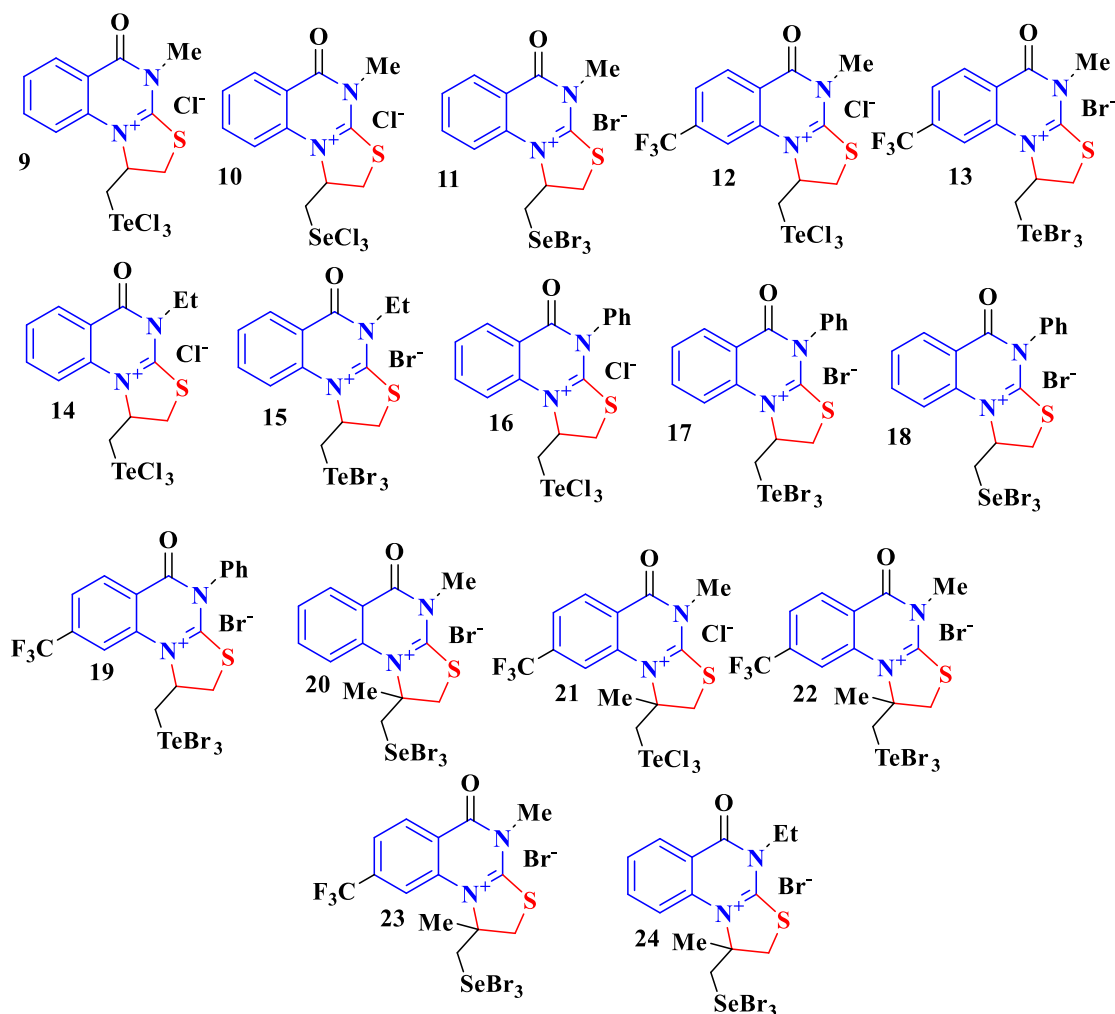
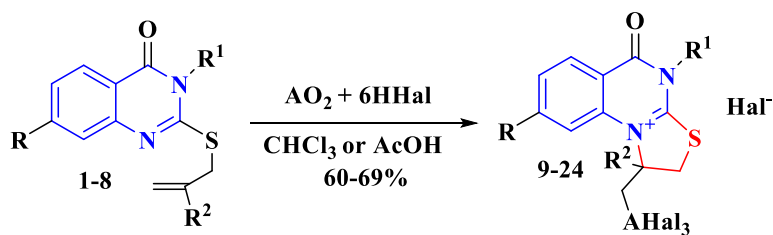


В рівноважній суміші наявні електрофільні реагенти для проходження як протоно-, так і халькогено-індукованої циклізації модельних тіоетерів.

Встановлено, що у випадку дії тетрагалогенідів халькогенів в середовищі хлороформу або льодяної оцтової кислоти на термінальні алільні тіоетери **1-8** відбувається анелювання тіазольного циклу до хіназоліну з утворенням моногалогенідів тригалогенохалькогенометил заміщених похідних тіазолінохіназолонію **9-24**.

У випадку використання в якості електрофілу тетрахлориду селену продукт циклізації — хлорид 4-метил-5-оксо-1-((трихлоро- $\lambda^4$ -селаніл)метил)-1,2,4,5-тетрагідротіазоло[3,2-*a*]хіназолін-10-ію виділено тільки у випадку 2-алілтіо-3-метилхіназолін-4-ону. При введенні етильного або фенільного замісника в положення 3 вихідного алільного тіоетеру в реакцію селенохлорування виділити індивідуальний продукт не вдалося. Зміна умов проведення реакції (нагрів або охолодження реакційної суміші, збільшення часу перемішування, інертна атмосфера проведення синтезу) не дозволяє отримати бажаного продукту у випадку селенохлорування.

Будову всіх новосинтезованих сполук доведено спектрами ЯМР  $^1\text{H}$  та  $^{13}\text{C}$ , а склад елементним аналізом.



Таким чином, регіохімія процесу електрофільної внутрішньомолекулярної гетероциклізації алільних та металільних тіоетерів хіназолін-4-ону не залежить від природи електрофільного халькогеновмісного реагенту і приводить до утворення біологічно перспективних тіазолінохіназолінієвих моногалогенідних солей ангулярної будови.

## СИНТЕЗ ФЕРОЦЕНОВМІСНИХ ТЕТРАГІДРОПІРИДАЗИНІВ

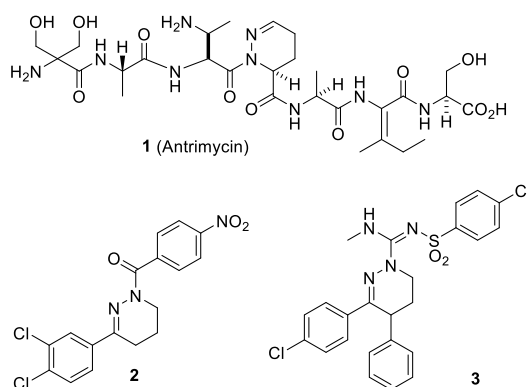
К.І. Тимошенко, В.О. Пальчиков

Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара

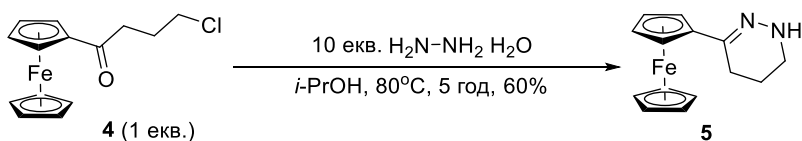
49010, м. Дніпро, пр-т Науки, 72

На сьогодні серед важливих сполук, що включають заміщений 1,4,5,6-тетрагідропіридазиновий фрагмент, є такі засоби, як природний антибактеріальний препарат Antrimycin (**1**), активний проти *Mycobacterium smegmatis* ATCC 607, а також ліганд рецептора прогестерона **2** та антагоніст канабіноїдного рецептора CB1 **3** [1]. З іншого боку, в недавньому огляді [2] наведено структури десятків перспективних фероценвмісних кандидатів на лікарські препарати проти різних видів раку, малярії, патогенних бактерій та грибків, вірусних захворювань та багато іншого.

В нашій роботі знайдено шлях поєднання в одній молекулі таких важливих фармакофорних фрагментів як фероценовий та тетрагідропіридазиновий.

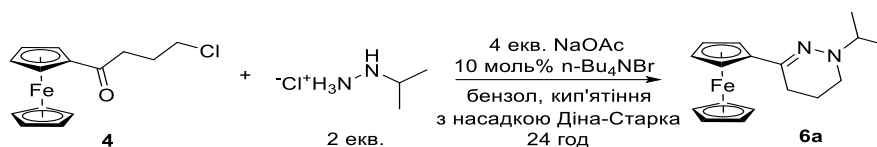


Першою синтезованою речовиною став 3-фероценіл-1,4,5,6-тетрагідропіридазин **5**, що був одержаний з виходом 60% взаємодією хлоркетона **4** з надлишком гідразин-гідрату в ізопропанолі.

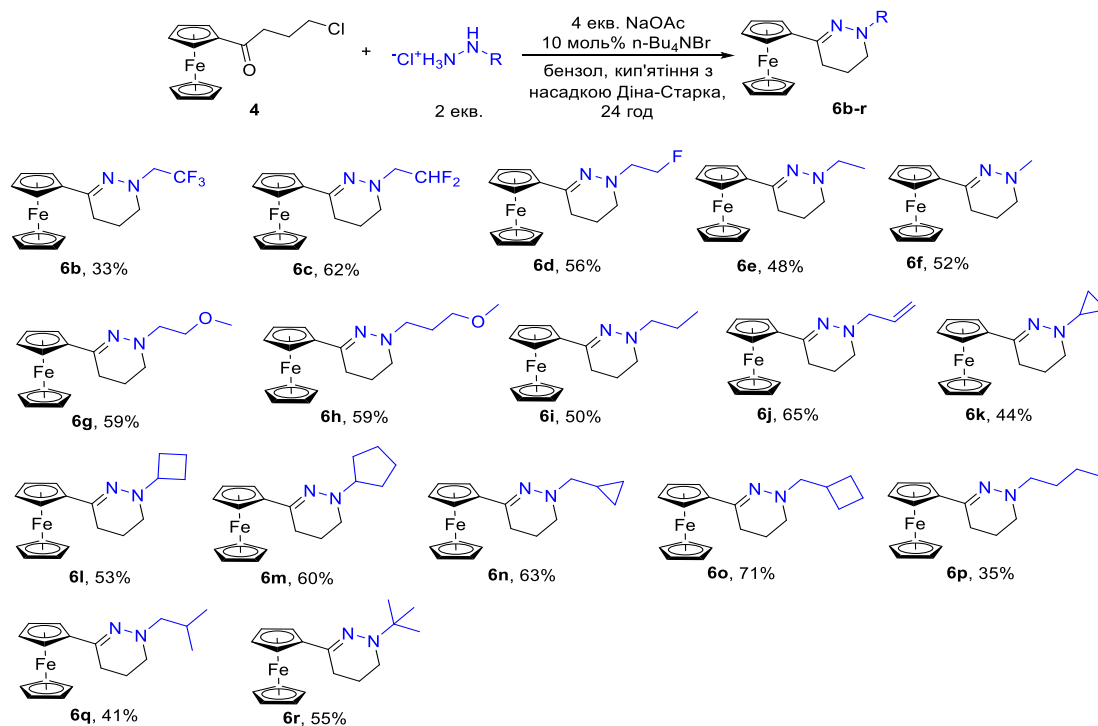


У якості наступного кроку, у реакцію були введені алкілгідразини. Для цього, було проведено оптимізацію умов реакції з використанням сполуки **6a** в якості модельної. Найоптимальнішими виявилися умови, за яких реакційна суміш в бензолі кип'ятиться з насадкою Діна-Старка для видалення води протягом 24 годин в присутності ацетату натрію та тетрабутиламоній броміду.

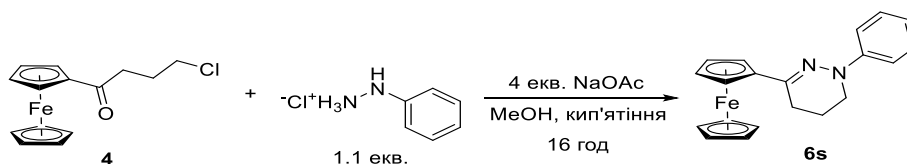
**XXIII Всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань сучасної хімії, Дніпро, 19-22 травня 2025 р.**



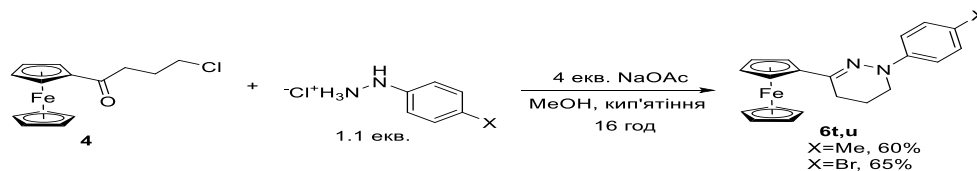
В подальшому, було синтезовано сполуки **6b-r** з хлоркетону **4** та відповідних алкілгідазинів з виходами 33–71%.



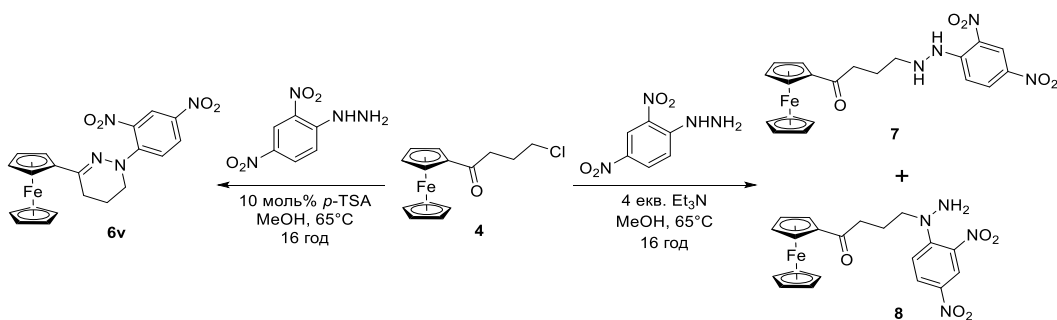
Далі, в реакцію були введені арилгідазини. Аналогічно до алкілгідазинів, було проведено оптимізацію умов синтезу на прикладі продукту **6s**.



Були одержані продукти взаємодії **4** з 4-метил та 4-бромфенілгідазином, відповідно **6t** та **6u**.

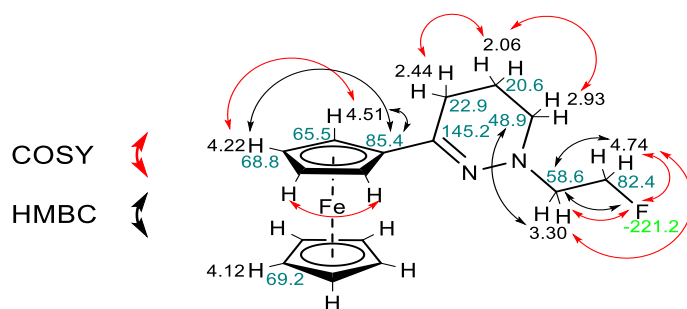


Також, в реакцію було введено 2,4-динітрофенілгідазин, який в залежності від умов реакції утворював очікуваний продукт **6v** та суміш **7** і **8**.



Усі одержані сполуки були охарактеризовані за допомогою <sup>1</sup>H, <sup>13</sup>C (також <sup>19</sup>F у випадку фторзаміщених похідних) ЯМР-спектроскопії.

Для сполуки 6d були проведені експерименти з двовимірної ЯМР-спектроскопії, COSY та HMBC.



Дослідження було частково профінансовано Міністерством закордонних справ Чеської Республіки в межах проєкту № 24-PKVV-UM-011 «Посилення стандартів викладання, досліджень та міжнародного співробітництва в Дніпровському національному університеті імені Олеся Гончара (ДНУ)», реалізованого Карловим університетом і ДНУ. The research was partially funded by the Ministry of Foreign Affairs of the Czech Republic under project 24-PKVV-UM-011, "Strengthening the standards of teaching, research and international cooperation at Oles Honchar Dnipro National University (DNU)" implemented by Charles University and DNU.

### Бібліографічні посилання

[1] Diastereoselective synthesis of functionalized tetrahydropyridazines containing indole scaffolds via an inverse-electron-demand aza-Diels–Alder reaction / T. Chen, C. Che, Z. Guo, X.-Q. Dong, C.-J. Wang // *Org. Chem. Front.* – 2021. – Vol. 8, № 16. – P. 4392–4398.

[2] Ferrocene-based drugs, delivery nanomaterials and fenton mechanism: state of the art, recent developments and prospects / C. Ornelas, D. Astruc // *Pharmaceutics.* – 2023. – Vol. 15, № 8. – номер статті 2044.

Секція  
**ХІМІЯ ТА ХІМІЧНА  
ТЕХНОЛОГІЯ  
ВИСОКОМОЛЕКУЛЯРНИХ  
СПОЛУК**

**Керівник:** доц., канд. хім. наук Косіцина Олена Сергіївна

**Секретар:** доц., канд. хім. наук Поджарський Михайло Абрамович

## **OPTIMIZATION OF THE MASS CHARACTERISTICS OF A LOWER LIMB PROSTHETIC SOCKET**

**A. Kucherenko**, A. Boshchuk, O. Pomirko, N. Baran, V. Moravskyi  
Department of Chemical Technology of Plastics Processing, Lviv Polytechnic National University, UKRAINE, Lviv, 12 Bandera str.

E-mail: [anastasiia.m.kucherenko@lpnu.ua](mailto:anastasiia.m.kucherenko@lpnu.ua)

Topological optimization is a modern approach to the design of engineering systems that allows you to determine the effective placement of material in a given volume of the structure, in accordance with the acting loads, boundary conditions and constraints. The method is used to achieve maximum strength or stiffness with minimal mass of the structure. The basis of the technique is the iterative removal of material from the zone that does not carry a significant load [1].

In the field of biomedical engineering, topological optimization has gained particular popularity due to the possibility of creating individual prostheses and implants. For example, such methods are actively used in the creation of titanium implants for maxillofacial surgery, as well as components of orthopedic systems - femoral implants, knee components, etc. [2]. In lower limb prosthetics, optimization allows you to reduce the weight of the prosthesis without reducing its functionality and reliability, which is especially important for patients leading an active lifestyle.

In this study, the object of optimization is the prosthesis socket - an element of the prosthesis that provides contact with the stump of the amputated limb and fixation of the entire prosthesis structure. The initial model was created using 3D scanning of the patient's stump and further processing in the SolidWorks CAD environment. The proposed design is made using additive technologies, which allows for the implementation of complex geometry that is not available using classical forming methods.

The material for manufacturing was selected engineering plastic nylon 6/10 with a density of 1.4 g/cm<sup>3</sup>. The initial mass of the product was 430.27 g. The SolidWorks Simulation module was used to perform topological optimization. The boundary conditions of the optimization were the fixation points and the load calculated according to the patient's weight. An important condition was also to maintain the specified volume of material in areas of increased loads - iprosthesis socket. The figure shows the basic model of the prosthesis socket. This model became the starting point for optimization.

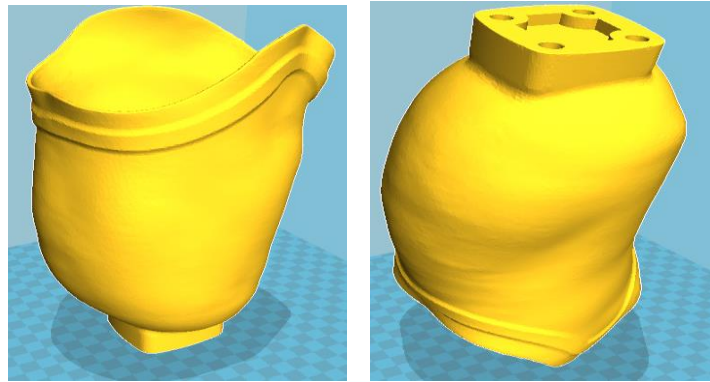


Fig. 1. Initial 3D model of the prosthesis socket of the lower limb

The first optimization option involved removing material from the prosthetic socket by creating through-holes. However, this design has certain functional limitations, as it prevents the use of vacuum suspension of the socket on the patient's limb. Therefore, an alternative approach was proposed: optimization of the model while preserving a solid shell of fixed thickness, ensuring airtightness and enabling vacuum fixation. As a result of topological optimization of the original model, it was possible to reduce the mass of the structure by more than 20% without losing its strength characteristics. Analysis of the stress-strain state confirmed uniform load distribution and the absence of overload zones. Such results indicate the feasibility of further implementation of the technology in real clinical conditions. A significant advantage is the ability to adapt the optimized structure to the individual anatomical features of the patient. Personalization of structures in combination with 3D printing allows you to create unique functional prostheses in a short time and with less material consumption. Thus, the application of topological optimization for the fabrication of lower limb prosthetic sockets provides effective weight reduction of the structure without compromising its mechanical strength, opening up prospects for the widespread adoption of these technologies in personalized prosthetics. The combination of optimization methods with additive manufacturing technologies enables the creation of functionally efficient, personalized, and lightweight prostheses.

References:

- [1] Zhang, H., & Li, Y. (2024). Topology Optimization: A Review for Structural Designs Under Static and Dynamic Loads. *Materials*, 17(23), 5970.
- [2] Nayak, C., Singh, A., & Chaudhary, H. (2017). Topology optimisation of transtibial prosthesis socket using finite element analysis. *International Journal of Biomedical Engineering and Technology*, 25(4), 345–359.

## **СУЧАСНІ НАПРЯМИ ВДОСКОНАЛЕННЯ ТЕХНОЛОГІЇ ВИРОБНИЦТВА ПОЛІЕТИЛЕНТЕРЕФТАЛАТУ**

Попадюк М.В., Поджарський М.А.

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

Поліетилентерефталат (ПЕТФ) — один з найбільш поширених термопластичних поліестерів, який широко використовується у виготовленні синтетичних волокон, харчової упаковки, плівки, електроізоляційних матеріалів тощо. Хоча технологія його виробництва добре відпрацьована і використовується в промисловості десятиліттями, сучасні вимоги до якості продукції, енергоефективності та екологічності стимулюють пошук шляхів її удосконалення. Нижче розглядаються основні напрямки, які можуть суттєво підвищити ефективність виробництва ПЕТФ без радикальної зміни базової технології.

Перший напрям — це вдосконалення каталітичної системи, яка використовується на стадії переестерифікації. Традиційно як каталізатор застосовують ацетат цинку або ацетат кобальту, проте сучасні дослідження пропонують альтернативу – органотитанові сполуки, зокрема спіродибутоксибісбортитану (ТБ-1) [1]. Цей каталізатор відрізняється підвищеною термостабільністю та кращою селективністю реакції. Його перевага полягає в тому, що він зберігає активність протягом усього процесу та зменшує утворення побічних продуктів, таких як ацетальдегід, який погіршує властивості кінцевого полімеру [2].

Другий напрям – це модернізація допоміжних апаратів, зокрема теплообмінного обладнання, яке використовується для конденсації парів метанолу, що утворюються під час синтезу. Замість традиційних кожухотрубних теплообмінників з гладкими трубами доцільно використовувати апарати з оребреними або турбулізованими трубами [3]. Наприклад, гвинтові або стрічкові турбулізатори, дозволяють інтенсифікувати теплообмін без збільшення габаритів обладнання. Це дає

змогу зменшити витрати на охолодження і знизити загальну собівартість продукції.

Третім напрямом є впровадження автоматизованих систем керування технологічним процесом. Для гнучкого регулювання температури, тиску та тривалості окремих стадій виробництва ефективним є застосування програмованих логічних контролерів (PLC) [4]. Наприклад, цифрові датчики дозволяють безперервно моніторити в'язкість полімеру та оперативно корегувати хід реакції поліконденсації без зупинки виробництва. Це особливо важливо для великих підприємств, де навіть незначні відхилення від технологічних норм призводять до втрат сировини.

Ще один напрям – повторне використання допоміжних речовин. Під час виробництва ПЕТФ утворюється велика кількість метанолу, який можна не лише конденсувати, але й очищати та повертати у виробництво [5]. Впровадження замкненого циклу циркуляції метанолу зменшує екологічне навантаження на довкілля та витрати на сировину. Крім того, теплову енергію гарячих конденсатів можна застосовувати для попереднього нагріву сировини, що підвищує енергоефективність процесу.

Наступний напрям – модифікація властивостей кінцевого продукту. Для отримання ПЕТФ із заданими характеристиками доцільно використовувати модифікатори — похідні аліфатичних кислот, поліолів або розгалужених діолів [5]. Вони дозволяють регулювати кристалічність, теплостійкість та гнучкість полімеру залежно від його подальшого застосування.

На напряму вдосконалення кінцевого етапу виробництва одним із перспективних рішень є використання установки підводного гарячого різання з подальшою термообробкою грануляту [4]. Це дозволяє уникнути

додаткового нагріву на подальших етапах виробництва та забезпечує кращу стабільність полімеру під час переробки.

Підсумовуючи, можна виділити такі напрями вдосконалення виробництва ПЕТФ:

1. Використання ефективніших та екологічно безпечних каталізаторів.
2. Модернізація теплообмінного обладнання за рахунок турбулізації.
3. Автоматизація управління технологічними параметрами.
4. Рециклінг метанолу та інших побічних речовин.
5. Застосування модифікаторів для корегування властивостей кінцевого продукту.

Реалізація цих заходів не лише підвищить продуктивність виробництва, але й забезпечить відповідність сучасним стандартам енергоефективності та екологічної безпеки. Саме тому пошук інноваційних рішень у виробництві ПЕТФ залишається актуальним завданням для науки та промисловості.

#### ПЕРЕЛІК ПОСИЛАНЬ

1. Ghosh P. Polymer Science and Technology: Plastics, Rubbers, Blends and Composites. 3rd ed. Tata McGraw-Hill Education, 2010. 470 p.
2. Klemeš J. J. Handbook of Process Integration (PI): Minimisation of Energy and Water Use, Waste and Emissions. Elsevier, 2013. 1184 p.
3. Sayer M., Sherman L. PET: Polymer, Processing, Applications, and Recycling. Springer, 2016. 266 p.
4. Othmer K. Encyclopedia of Chemical Technology. Wiley, 2014. Т. 20.
5. Wypych G. Handbook of Polymers. 2nd ed. ChemTec Publishing, 2022. 862 p.

## **ОПТИМІЗАЦІЯ КАТАЛІТИЧНИХ СИСТЕМ ДЛЯ КУМОЛЬНОГО МЕТОДУ ОТРИМАННЯ ФЕНОЛУ: ПОРІВНЯЛЬНИЙ АНАЛІЗ АЛЬТЕРНАТИВ СУЛЬФАТНІЙ КИСЛОТИ**

Верташ Д.С., Поджарський М.А.

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

Традиційний кумольний метод отримання фенолу та ацетону з використанням сульфатної кислоти як каталізатора має суттєві недоліки: високу корозійну активність кислоти, необхідність нейтралізації її залишків, утворення великої кількості сольових відходів, складність регенерації каталізатора. Ці фактори значно збільшують собівартість процесу та погіршують його екологічний вплив. Наразі особливу увагу приділяють розробці гетерогенних каталітичних систем, які дозволяють усунути ці проблеми [1].

*Кислотооброблені глини (монтморилоніти)* – це шаруваті алюмосилікати, які після кислотної обробки (HCl, H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>) набувають властивостей ефективних каталізаторів. Кислотна обробка створює мезопори, збільшує питому поверхню та активність каталізатора. У реакторах витиснення такі каталізатори забезпечують стабільну роботу до 1000 годин. За температури 80 °С, навантаження 32,5 % на носій забезпечується вихід фенолу до 95 % із селективністю понад 99 %. Переваги таких каталізаторів: дешевизна сировини, стабільність, екологічна безпека, простота регенерації. Недоліки: чутливість до умов активації та поступова дезактивація.

*Гетерополікислоти (ГПА)* – це складні протонні кислоти, які утворюються шляхом конденсації оксокислот перехідних металів. Найбільш дослідженими є ГПА зі структурою Кеггіна. Імобілізація гетерополікислот на носіях (глина, TiO<sub>2</sub>) дозволяє уникнути їх втрат та збільшити площу поверхні. Експерименти з додекатунгстофосфоруною кислотою показали, що при їх нанесенні на монтморилонітову глину

можна досягти до 99 моль.% виходу фенолу навіть за високої швидкості подачі та повного перетворення гідроперекису ізопропілбензолу. Розкладання на твердокислотних каталізаторах, кислотоактивованому монтморилоніті K10 і метал-іонообмінному (K10) при 30–60 °С додекатунгстофосфорна кислота показала 100% перетворення протягом 5 хв при 30 °С [3]. Модифіковані солі ГПА та монтморилонітових глини демонструють високу селективність та можливість багаторазового використання при високих значеннях ступені перетворення.

*Цеоліти.* Протягом останніх трьох десятиліть цеоліти стають все більш актуальними каталізаторами, оскільки вони дешеві, легкодоступні та – завдяки своїй сильній кислотності – здатні замінити мінеральні кислоти. Найбільш ефективними є цеоліти типу Beta і ZSM-5, які здатні забезпечити 100% перетворення вже при кімнатній температурі протягом 5 хвилин [2]. Водночас селективність до фенолу сягає 86–92%, а в стаціонарних умовах – до 95%. Цеоліти з меншими порами, як-от ZSM-22 і ZSM-48, мають гіршу конверсію через обмежену дифузію. Покращення доступу до кислотних центрів, наприклад, шляхом зменшення розміру частинок кристалів ZSM-5, дозволяє суттєво підвищити ефективність каталізу. Процес також залежить від кількості та сили кислотних центрів. Цеоліти HUSY із відношенням Si/Al 15–40 демонструють здатність до 100% перетворення навіть за 20 хв при 60 °С, але потребують активації. Загалом, цеоліти є високоефективними каталізаторами, проте їх активність сильно залежить від структури пор, кислотності, розміру частинок і попередньої активації.

*Іонообмінні смоли.* Іонообмінні смоли, зокрема на основі полістиролу зі сульфокислотними групами, ефективно використовуються як каталізатори для розкладу гідроперекису ізопропілбензолу. Смоли типу AMBERLYST 35 і TH-02 демонструють високу конверсію — до 100% при

температурі 90 °С – і селективність до фенолу становить 99,9% при 60 °С і дещо знижується до 97% при 98 °С. Великі внутрішні пори ТН-02 сприяють високій ефективності, але зменшене зшивання робить матеріал менш стабільним, тому для них застосовують спеціальні реактори. Сухі смоли проявляють кращу активність, ніж вологі, оскільки вода негативно впливає на дегідратаційну стадію реакції [3].

#### Висновки

Проведений аналіз демонструє, що сучасні гетерогенні каталізатори можуть ефективно замінити сульфатну кислоту в технології виробництва фенола кумольним методом.

Кислотооброблені глини поліпшують економічні показники виробництва. Гетерополікислоти значно підвищують продуктивність технології. Цеоліти перспективні для зниження температури процесу. Іонообмінні смоли забезпечують для точного контролю селективності.

Перехід на гетерогенні каталітичні системи дозволить знизити собівартість виробництва, скоротити утворення відходів, підвищити екологічну безпеку технологічного процесу.

#### ПЕРЕЛІК ПОСИЛАНЬ

1. Solid Acid Catalysts for the Hock Cleavage of Hydroperoxides / J. Drönner та ін. *Catalysts*. 2022. Т. 12, вип. 1. URL: <https://doi.org/10.3390/catal12010091>.
2. Zeolite-Based Catalysis for Phenol Production / P. Carlo та ін. *Industrial & Engineering Chemistry Research*. 2021. Т. 60, вип. 18. URL: <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.0c05886>.
3. Catalytic decomposition of cumene hydroperoxide into phenol and acetone / R. Selvin та ін. *Applied Catalysis A General*. 2001. Т. 219. С. 125–129. URL: [https://www.researchgate.net/publication/244107454\\_Catalytic\\_decomposition\\_of\\_cumene\\_hydroperoxide\\_into\\_phenol\\_and\\_acetone](https://www.researchgate.net/publication/244107454_Catalytic_decomposition_of_cumene_hydroperoxide_into_phenol_and_acetone) (дата звернення: 16.04.2025).

## **ЕЛЕКТРОПРОВІДНІСТЬ РОЗЧИНІВ НА ОСНОВІ ВОДОРОЗЧИННИХ ПОЛІМЕРІВ**

Гриценко Т. О.

Національний університет “Львівська політехніка”,  
м. Львів, вул. Степана Бандери, 12

Серед широкого спектру гідрогелевих полімерних матеріалів, відомих на даний час, гідрогелі на основі прищеплених кополімерів 2-гідроксіетилметакрилату (ГЕМА) з полівінілпіролідом (ПВП) володіють рядом цінних експлуатаційних властивостей [1]. Особливо цікавими є кополімери на основі ГЕМА та ПВП (пГЕМА-пр-ПВП), отримані в присутності солей металів змінного ступеня окиснення. Порівняно з традиційними методами термоініційованої, фото- та радіаційної полімеризації в блоці чи розчині, які характеризуються багатостадійністю та довготривалістю, ініціювання солями металів відзначається високою реакційною здатністю та малими енергетичними параметрами.

Однак, прищеплені полімери на основі ПВП мають не завжди достатню міцність, сорбційні та дифузійні характеристики. Проблема може бути вирішена або за допомогою синтезу нових матеріалів із заданим комплексом властивостей, або модифікацією вже існуючих. Одним із методів модифікування пГЕМА-пр-ПВП кополімерів є введення у їх структуру додаткових функціональноактивних водорозчинних полімерів (ВП), які, прогнозовано, залежно від природи, забезпечать підвищення необхідних властивостей. Важливим питанням модифікації гідрогелів в цьому напрямку є дослідження комплексоутворення між полімерами, які вводяться у вихідну композицію з ПВП та ГЕМА. Присутність таких комплексів безперечно буде впливати на ефективність змішування компонентів вихідної композиції, формування структури і, відповідно, на властивості одержаних кополімерів і гідрогелів на їх основі.

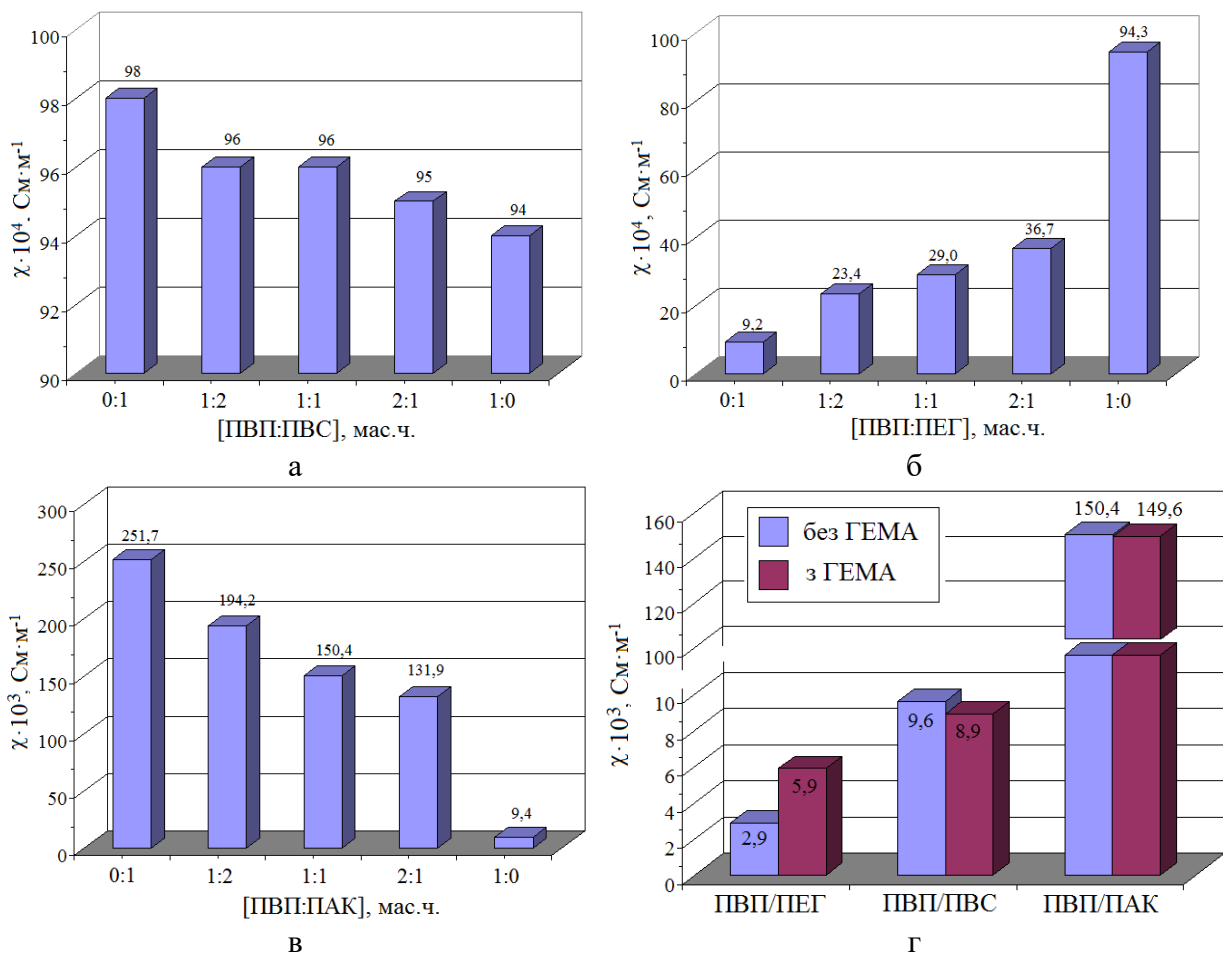
Про можливу взаємодію між ПВП, ГЕМА та ВП робили висновок на основі дослідження електропровідності водних розчинів їх сумішей. Як ВП

в роботі використані полівініловий спирт (ПВС), поліетиленгліколь (ПЕГ) та поліакрилова кислота (ПАК).

Якісним доказом утворення комплексів в згаданих системах є поява забарвлення їх розчинів (зокрема ГЕМА з ВП), а також випадання утворених комплексів в осад (наприклад, у випадку одержання водних розчинів сумішей ПВС/ПВП, ПЕГ/ПВП та ПАК/ПВП). Дослідження електропровідності водних розчинів використовуваних в роботі ВП підтверджує природу полімерів – всі досліджувані полімери є поліелектролітами, причому електропровідність розчинів зростає із збільшенням їх концентрації. Встановлено, що електропровідність розчинів полімерів зростає в ряду: ПЕГ < ПВП < ПВС < ПАК

На таку залежність, закономірно, впливає присутність та природа (полярність) функціональних груп, здатних брати участь у сприянні проведенню електричного струму. Очевидно, що висока електропровідність водних розчинів ПВП, ПВС та ПАК пов'язана з утворенням їх йонної форми.

Оскільки об'єктом дослідження в роботі є комбіновані матриці на основі ПВП з ПЕГ, ПВС та ПАК, були проведені дослідження електропровідності розчинів ПВП/ПЕГ, ПВП/ПВС та ПВП/ПАК (рис. 1, а-в), а також впливу на провідність цих розчинів присутності мономеру – ГЕМА (рис. 1, г). Як свідчать одержані результати, у кожному випадку, введення полімеру із більшою електропровідністю, викликає підвищення електропровідності розчину. Різносторонній вплив на електропровідність розчинів сумішей полімерів чинить присутність мономеру (рис. 1, г) – у випадку розчину суміші полімерів ПВП/ПЕГ електропровідність зростає, для розчину ПВП/ПВС – зменшується, при введенні мономеру у розчин суміші ПВП/ПАК електропровідність розчину майже не змінюється.



**Рис. 1.** Залежність питомої електропровідності ( $\chi$ ) водних розчинів ПВП/ПВС (а), ПВП/ПЕГ (б), ПВП/ПАК (в) від співвідношення ПВП/ВІ ( $C_{\text{ПВП/ВІ}}=10$  г/л) та присутності мономеру (г) (ПВП:ВІ=1:1 мас.ч., ПВП:ГЕМА=1:1 мас.ч.)

Присутність у розчинах двох полімерів з різною активністю не дає можливості зробити висновок про взаємодію конкретного полімеру з мономером. Тому, було досліджено вплив присутності ГЕМА на електропровідність окремих розчинів ПВП, ПВС, ПЕГ та ПАК (рис. 2). Як бачимо з приведених результатів, додавання мономеру до розчинів ПВП (рис. 2,а), ПВС (рис. 2,б) та ПАК (рис. 2,в) викликає зменшення їх електропровідності. Додавання ж ГЕМА до розчину ПЕГ призводить до підвищення його провідності. Встановлені зміни електропровідності систем полімер/мономер у кожному випадку характеризують присутність фізичної взаємодії між її компонентами.

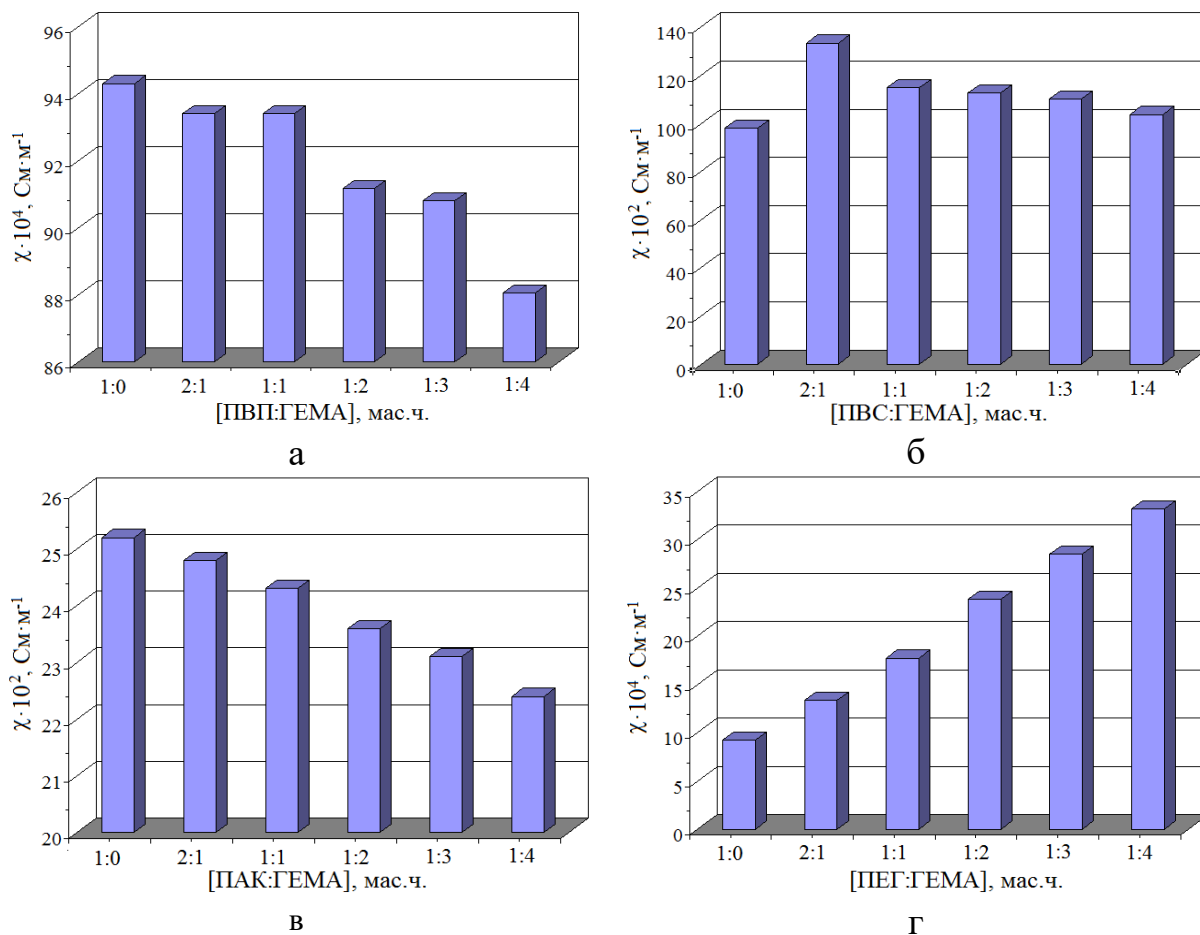


Рис. 2. Залежність питомої електропровідності ( $\kappa$ ) розчинів ВП від вмісту ГЕМА. ВП: а – ПВП; б – ПВС; в – ПАК; г – ПЕГ

У випадку ПВП, ПВС та ПАК, в структурі яких присутні гідрофільні полярні групи з координованими молекулами води, мономер, імовірно, заміщає молекули  $\text{H}_2\text{O}$  та блокує активні центри макромолекул внаслідок утворення водневих зв'язків. Підвищення електропровідності розчину ПЕГ в присутності ГЕМА свідчить про електростатичну взаємодію між полімером та мономером. Отримані в роботі результати дозволять розробити практичні рекомендації під час прогнозованого модифікування пГЕМА-пр-ПВП кополімерів та одержання гідрогелів на їх основі з необхідними характеристиками.

## **ПЕРСПЕКТИВНІ ШЛЯХИ ВДОСКОНАЛЕННЯ ВИРОБНИЦТВА ЕМУЛЬСІЙНОГО ПОЛІВІНІЛХЛОРИДУ**

Онянов Є.О., Поджарський М.А.

*Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара*

*49010, м. Дніпро, просп. Гагаріна, 72*

Емульсійний полівінілхлорид (ПВХ), попри невелику частку у загальному обсязі виробництва ПВХ, залишається критично важливим для спеціалізованих продуктів – таких як пластизолі для штучної шкіри, покриттів тощо. Сучасні вимоги до ефективності, екологічності та якості продукції роблять актуальною оптимізацію технології без радикальної зміни виробничої інфраструктури.

Одним із напрямів є вдосконалення складу реакційної суміші, зокрема, шляхом використання більш сучасних ініціаторів та емульгаторів, які забезпечують кращу контрольованість процесу та стабільність властивостей продукту. Так, заміна персульфату калію на окисно-відновні системи з регульованою активністю дозволяє знизити температуру полімеризації, зменшити енергоспоживання та ризик термодеструкції полімеру. Використання бінарних або тринарних систем емульгаторів дозволить поліпшити стабільність латексу, та краще контролювати розміри його частинок. Впровадження біорозкладних або нетоксичних добавок зменшить негативний вплив на довкілля та дозволить розширити сфери застосування кінцевого продукту, наприклад, в харчовій упаковці або побутових виробках [1].

Інший напрям вдосконалення технології – зменшення втрат мономеру через вдосконалення процесу дегазації. Заміна традиційних насадок (кілець Рашига) на сучасні структуровані забезпечить краще змочування та більшу поверхню масообміну. Впровадження мембранної дегазації дозволить працювати при нижчих температурах, зменшити втрати емульсії завдяки м'якому режиму розділення фаз, також підвищити чистоту продукту [2].

Ще один шлях оптимізації процесу – впровадження цифрового моніторингу параметрів (температура, тиск, рН, ступінь конверсії) для оперативного коригування процесу. Це особливо важливо для емульсійної полімеризації, де дрібні зміни параметрів можуть суттєво вплинути на дисперсність частинок та стабільність латексу. Перспективним є створення цифрових моделей технологічного процесу (цифрових

*XXIII Всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань сучасної хімії, Дніпро, 19-22 травня 2025 р.*

двійників) на основі експериментальних даних, що дозволяють моделювати сценарії оптимізації та передбачати потенційні збої [3].

ПВХ має проблемну репутацію в екологічному плані через вміст хлору і потенційне виділення хлороводню. Слід замінити фталатні пластифікатори на альтернативні, наприклад, на основі ефірів лимонної кислоти або рослинних олій.

Необхідно впроваджувати методи рекуперації непрореагованого вінілхлориду на всіх етапах виробництва, включаючи подачу і транспортування мономеру, що знижує викиди та економить сировину [4].

#### Висновки

Перспективними напрямками вдосконалення виробництва емульсійного ПВХ є:

- модифікація рецептурних компонентів для підвищення ефективності та екологічності,
- модернізація обладнання для дегазації,
- цифровізації процесів контролю та управління,
- комплексна екологізація всього технологічного ланцюга.

Реалізація цих заходів дозволить досягти сукупної ефективності: зниження енерговитрат, підвищення якості продукту та відповідності міжнародним екологічним стандартам – без значних капітальних витрат.

#### ПЕРЕЛІК ПОСИЛАНЬ

1. Vale H. M., McKenna T. F. L. Particle formation in vinyl chloride emulsion polymerization: Experimental study. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2008. Vol. 47, No. 21. P. 8107–8118.
2. Dorobantu Bodoc M., Prat L., Xuereb C., Gourdon C., Lasuye T. Online monitoring of vinyl chloride polymerization in a microreactor using Raman spectroscopy. *ChemistryViews*, 2012.
3. Sood A. Increasing PVAc emulsion polymerization productivity – an industrial application. *Indian Journal of Chemical Technology*, 2010. Vol. 17. P. 34–42.
4. Raffin M., Dugas P.-Y., Melchin T., D'Agosto F., Lansalot M. Synthesis of well-defined poly(vinyl alcohol-co-vinyl acetate) copolymers by alcoholysis of poly(vinyl acetate) synthesized by macromolecular design via interchange of xanthate polymerization, and their use as a stabilizer in emulsion (co)polymerization of vinyl acetate. *Biomacromolecules*, 2024. Vol. 25, No. 9. P. 6060–6071.

Секція  
**ФІЗИЧНА ТА  
НЕОРГАНІЧНА ХІМІЯ**

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

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

## КРИСТАЛІЧНА СТРУКТУРА $P6_3$ - $Pr_3Mn(Co)_{0.1}Ga_{1.6}S_7$

Блашко Н.М., Марчук О.В.

Волинський національний університет імені Лесі Українки

43025, м. Луцьк, просп. Волі, 13

e-mail: [blashko.nazarii@vnu.edu.ua](mailto:blashko.nazarii@vnu.edu.ua)

Зразки стехіометричних складів  $Pr_3Mn_{0.1}Ga_{1.6}S_7$  та  $Pr_3Co_{0.1}Ga_{1.6}S_7$  отримували сплавлянням празеодиму (Pr), мангану (Mn), кобальту (Co), галію (Ga) та сірки (S) високого ступеня чистоти у вакуумованих, до залишкового тиску ( $10^{-2}$  Па), кварцових контейнерах. Загальна маса вихідної шихти для кожного зразка становила 1.0 г. Сплавляння здійснювали в електричній муфельній печі з програмним управлінням технологічними процесами МП-30. Експериментальні дифрактограми синтезованих зразків отримували на рентгенівському дифрактометрі ДРОН 4-13 [ $10^\circ \leq 2\Theta \leq 100^\circ$ , крок сканування –  $0.05^\circ$ , експозиція у кожній точці – 10 с]. Розрахунок кристалічної структури виконано методом Рітвельда, який дозволяє отримати точні параметри структури шляхом аналізу дифракційних даних. Для цього використовували програмний пакет WinCSD [1], що забезпечує автоматизовану обробку та інтерпретацію результатів рентгенівської дифракції. Для візуалізації та детального аналізу структури використовували програму VESTA [2].

Сульфіди  $Pr_3Mn(Co)_{0.1}Ga_{1.6}S_7$  синтезували на основі тернарної сполуки  $Pr_3Ga_{1.67}S_7$  [3] шляхом часткового заміщення атомів Ga в ПСТ  $2a$  атомами Mn або Co. У таблиці 1 наведено умови проведеного експерименту та кристалографічні характеристики структури синтезованих сульфідів.

Таблиця 1. Результати розрахунку кристалічної структури  $Pr_3Mn(Co)_{0.1}Ga_{1.6}S_7$

Параметри	$Pr_3Mn_{0.1}Ga_{1.6}S_7$	$Pr_3Co_{0.1}Ga_{1.6}S_7$
Просторова група (№)	$P6_3$ (173)	$P6_3$ (173)
Символ Пірсона	$hP23.3$	$hP23.3$
$a$ , (Å)	10.0006(6)	9.9788(5)
$c$ , (Å)	6.0410(5)	6.0629(4)
Об'єм комірки (Å <sup>3</sup> )	523.2(1)	522.84(9)
Розрахована густина (г/см <sup>3</sup> )	4.8507(10)	4.8567(9)
Абсорбційний коефіцієнт (1/см)	1158.89	1161.50
$2\Theta$ та $\sin\Theta/\lambda$ (макс.)	100.00; 0.497	100.00; 0.497
$R_I$ ; $R_P$	0.0781; 0.1825	0.0696; 0.1669

Теоретичні, експериментальні та різницеві між ними дифрактограми синтезованих сульфідів представлено на рис. 1 та рис. 2. Уточнення координат та ізотропних теплових параметрів атомів у структурах

синтезованих сульфідів (таблиця 2 і таблиця 3) призвело до добротних значень  $R$ -факторів.

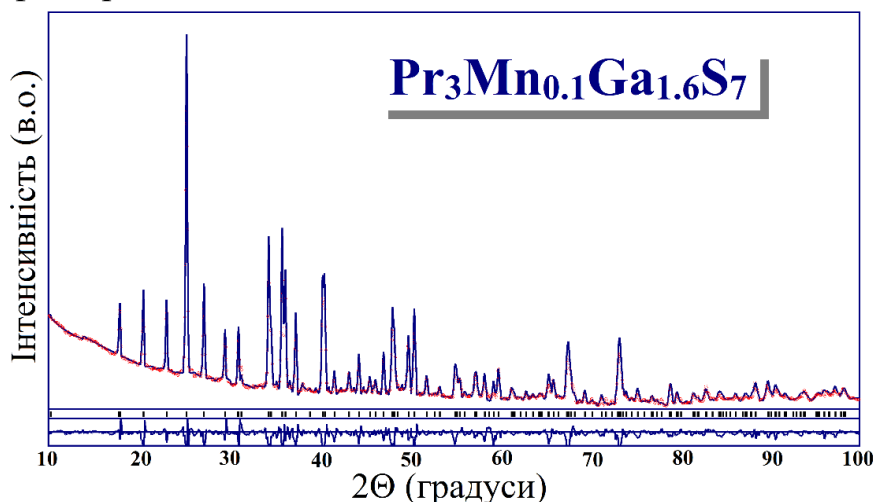


Рис. 1. Теоретична (—), експериментальна ( $^{\circ\circ\circ}$ ) та різниці між ними дифрактограми для  $\text{Pr}_3\text{Mn}_{0.1}\text{Ga}_{1.6}\text{S}_7$  [ $\text{CuK}\alpha$ -випромінювання ( $\lambda = 1.54185 \text{ \AA}$ )].

Таблиця 2. Координати та ізотропні параметри теплового коливання атомів у структурі сульфиду  $\text{Pr}_3\text{Mn}_{0.1}\text{Ga}_{1.6}\text{S}_7$

Атоми	ПСТ	$x/a$	$y/b$	$z/c$	КЗП	$B_{\text{ізо}} \times 10^2 (\text{Å}^2)$
Pr	6c	0.3738(2)	0.1454(2)	0.2343(11)	1.0	1.25(3)
Mn	2a	0	0	0.050(2)	0.1	1.60(10)
Ga1	2a	0	0	0.050(2)	0.6	1.60(10)
Ga2	2b	1/3	2/3	0.1573(14)	1.0	0.86(9)
S1	6c	0.1072(11)	0.5211(13)	0.013(2)	1.0	0.33(9)
S2	6c	0.1504(13)	0.2383(11)	0.290(2)	1.0	0.82(9)
S3	2b	1/3	2/3	0.494(4)	1.0	0.37(10)

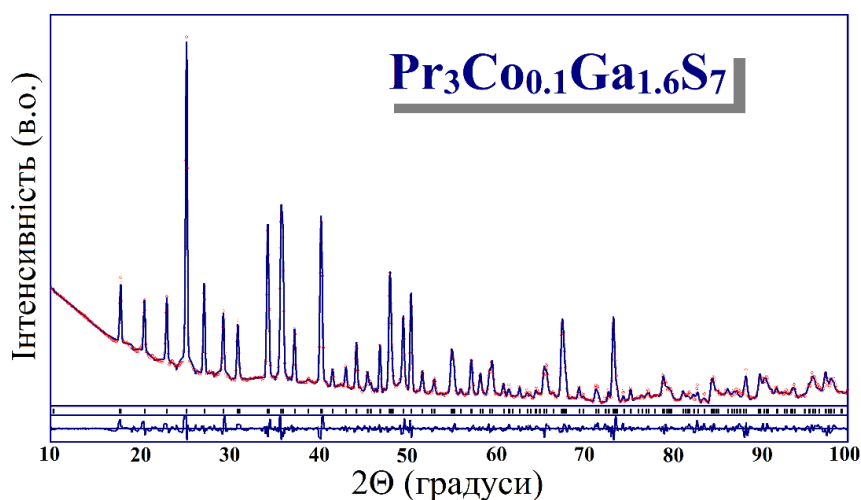


Рис. 2. Теоретична (—), експериментальна ( $^{\circ\circ\circ}$ ) та різниці між ними дифрактограми для  $\text{Pr}_3\text{Co}_{0.1}\text{Ga}_{1.6}\text{S}_7$  [ $\text{CuK}\alpha$ -випромінювання ( $\lambda = 1.54185 \text{ \AA}$ )].

Таблиця 3. Координати та ізотропні параметри теплового коливання атомів у структурі сульфїду  $\text{Pr}_3\text{Co}_{0.1}\text{Ga}_{1.6}\text{S}_7$

Атоми	ПСТ	$x/a$	$y/b$	$z/c$	КЗП	$B_{\text{iso}} \times 10^2 (\text{\AA}^2)$
Pr	6c	0.3790(2)	0.1469(2)	0.2152(7)	1.0	1.31(2)
Co	2a	0	0	0.043(2)	0.1	1.18(8)
Ga1	2a	0	0	0.043(2)	0.6	1.18(8)
Ga2	2b	1/3	2/3	0.1565(10)	1.0	1.01(7)
S1	6c	0.1099(11)	0.5342(12)	0.0238(14)	1.0	0.87(7)
S2	6c	0.1392(13)	0.2327(11)	0.2850(13)	1.0	1.43(7)
S3	2b	1/3	2/3	0.499(3)	1.0	0.88(8)

Кристалічна структура сульфїдів  $\text{Pr}_3\text{Mn}(\text{Co})_{0.1}\text{Ga}_{1.6}\text{S}_7$  належить до гексагональної сингонії (СТ  $\text{La}_3\text{CuSiS}_7$ ; ПГ  $P6_3$ ; СП  $hP24$ ) [4]. Координаційні поліедри та їх укладка у структурі синтезованих сульфїдів представлено на рис. 3 та рис. 4.

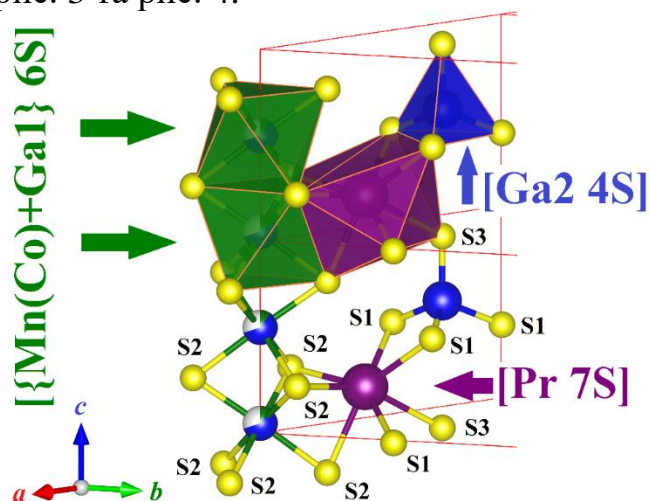


Рис. 3. Координаційні поліедри  $[\text{Pr } 7\text{S}]$ ,  $[\text{Mn}(\text{Co})+\text{Ga1} } 6\text{S}]$  та  $[\text{Ga2 } 4\text{S}]$  у структурі сульфїдів  $\text{Pr}_3\text{Mn}(\text{Co})_{0.1}\text{Ga}_{1.6}\text{S}_7$

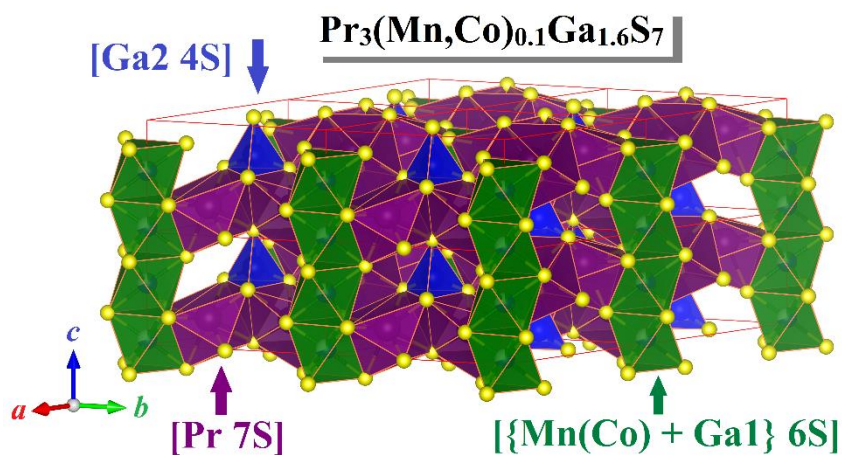


Рис. 4. Укладка поліедрів у структурі сульфїдів  $\text{Pr}_3\text{Mn}(\text{Co})_{0.1}\text{Ga}_{1.6}\text{S}_7$

Атоми Pr, заселяючи ПСТ 6с (x y z), координують по сім атомів S. Тригональні призми з одним додатковим атомом утворюють “блоки” 3 [Pr 7S]. У цих “блоках” тригональні призми між собою з’єднані ребрами.

Тригональні призми [Pr 7S] у структурі синтезованих сульфідів стають більш симетричними в порівнянні з цими ж призмами в структурі Pr<sub>3</sub>Ga<sub>1.67</sub>S<sub>7</sub> про що свідчить значення ефективних координаційних чисел (розрахованих за довжинами зв’язків) та індексів спотворення цих поліедрів: КЧ<sub>еф</sub>(χ) = 6.76(0.02449) [для Pr<sub>3</sub>Ga<sub>1.67</sub>S<sub>7</sub>], КЧ<sub>еф</sub>(χ) = 6.87(0.01718) [для Pr<sub>3</sub>Mn<sub>0.1</sub>Ga<sub>1.6</sub>S<sub>7</sub>] та КЧ<sub>еф</sub>(χ) = 6.81(0.02298) [для Pr<sub>3</sub>Co<sub>0.1</sub>Ga<sub>1.6</sub>S<sub>7</sub>].

Атоми {Mn(Co) + Ga1} статистично розподілені в центрах октаедрів [{Mn(Co) + Ga1} 6S], що сформовані атомами S і займають ПСТ 2a (0 0 z). Склад цієї суміші: 14.3 % Mn(Co) і 85.7 % Ga1. Октаедри утворюють нескінченні колони в напрямку головної осі та практично не зазнають деформації: КЧ<sub>еф</sub>(χ) = 5.98(0.00845) [для Pr<sub>3</sub>Ga<sub>1.67</sub>S<sub>7</sub>], КЧ<sub>еф</sub>(χ) = 5.96(0.01374) [для Pr<sub>3</sub>Mn<sub>0.1</sub>Ga<sub>1.6</sub>S<sub>7</sub>] та КЧ<sub>еф</sub>(χ) = 5.97(0.01180) [для Pr<sub>3</sub>Co<sub>0.1</sub>Ga<sub>1.6</sub>S<sub>7</sub>].

Атоми Ga2 локалізовані в ПСТ 2b (1/3 2/3 z) та центрують октаедри високої симетрії [Ga2 4S], які є ізольовані один від одного.

Введенням у структуру РЗМ-вмісних халькогенідів атомів хімічних елементів різної природи (переважно двовалентних d-елементів), можна корегувати геометричні параметри поліедрів (призм, октаедрів, тетраедрів, моноедрів і ін.), а отже, синтезувати матеріали з наперед заданими кристалічною структурою та фізичними властивостями.

Розраховані параметри поліедрів у структурах Pr<sub>3</sub>Mn(Co)<sub>0.1</sub>Ga<sub>1.6</sub>S<sub>7</sub> представлено у таблиці 4.

Таблиця 4. Параметри поліедрів у структурі Pr<sub>3</sub>Mn<sub>0.1</sub>Ga<sub>1.6</sub>S<sub>7</sub> (I) та Pr<sub>3</sub>Co<sub>0.1</sub>Ga<sub>1.6</sub>S<sub>7</sub> (II)

Фаза	Поліедр	Середня довжина зв’язку, Å	Об’єм поліедра, Å <sup>3</sup>	Індекс спотворення, χ	КЧ еф
I	[Pr 7S]	2.9227	34.9629	0.01718	6.87
	[{Mn+Ga1} 6S]	2.5771	22.7999	0.01374	5.96
	[Ga2 4S]	2.1349	4.9613	0.02298	3.87
II	[Pr 7S]	2.9335	35.2788	0.02316	6.82
	[{Co+Ga1} 6S]	2.5289	21.5082	0.01180	5.97
	[Ga2 4S]	2.0961	4.7073	0.00419	3.99

При переході  $Mn \rightarrow Co$  параметри елементарної комірки  $a$  зменшуються від 10.0006(6) Å (для  $Pr_3Mn_{0.1}Ga_{1.6}S_7$ ) до 9.9788(5) Å (для  $Pr_3Co_{0.1}Ga_{1.6}S_7$ ),  $b$  збільшується від 6.0410(5) Å (для  $Pr_3Mn_{0.1}Ga_{1.6}S_7$ ) до 6.0629(4) Å (для  $Pr_3Co_{0.1}Ga_{1.6}S_7$ ), а об'єм  $V$  зменшується від 523.2(1) Å (для  $Pr_3Mn_{0.1}Ga_{1.6}S_7$ ) до 522.84(9) Å (для  $Pr_3Co_{0.1}Ga_{1.6}S_7$ ) за рахунок зменшення величини йонних радіусів  $r(Mn^{2+}) = 0.81$  Å та  $r(Co^{2+}) = 0.79$  Å (для октаедричного оточення). Розраховані значення довжин зв'язків узгоджуються з сумами відповідних йонних радіусів [5] та наведені в таблиці 5.

Таблиця 5. Міжатомні відстані ( $\delta$ , Å) та КЧ атомів у структурі  $Pr_3Mn_{0.1}Ga_{1.6}S_7$  та  $Pr_3Co_{0.1}Ga_{1.6}S_7$

<b><math>Pr_3Mn_{0.1}Ga_{1.6}S_7</math></b>			<b><math>Pr_3Co_{0.1}Ga_{1.6}S_7</math></b>		
<b>Атом</b>	<b><math>\delta</math> (Å)</b>	<b>КЧ</b>	<b>Атом</b>	<b><math>\delta</math> (Å)</b>	<b>КЧ</b>
Pr	– S2	2.8362(3)	Pr	– S3	2.84144(12)
	– S1	2.8746(2)		– S1	2.86569(12)
	– S1	2.8816(2)		– S2	2.88338(15)
	– S2	2.9298(3)		– S2	2.90560(16)
	– S2	2.9303(3)		– S2	2.94729(15)
	– S3	2.9504(3)		– S1	3.04504(13)
	– S1	3.0562(3)		– S1	3.04596(14)
Mn+Ga1	– 3S2	2.54167(18)	Co+Ga1	– 3S2	2.499(8)
	– 3S2	2.61249(18)		– 3S2	2.559(8)
Ga2	– S3	2.0368(3)	Ga2	– S3	2.079(7)
	– 3S1	2.16766(17)		– 3S1	2.102(3)

- [1] Yu. Grin, L. Akselrud, WinCSD: *Software package for crystallographic calculations (Version 4)*, J. Appl. Cryst., 47(2), 803 (2014); <https://doi:10.1107/s1600576714001058>
- [2] K. Momma, F. Izumi, VESTA 3 for three-dimensional visualization of crystal, volumetric and morphology data, J. Appl. Cryst., 44(6), 1272 (2011); <https://doi:10.1107/S0021889811038970>
- [3] M. Patrie, M. Guittard, *Chimie minerale. Sur les composés du type  $Ce_6Al_{10/3}S_{14}$* , C. R. Acad. Sci., C, 268, 1136 (1969).
- [4] M. Guittard, M. Julien-Pouzol, *Les composés hexagonaux de type  $La_3CuSiS_7$* , Bull. Soc. Chim. Fr., 3, 2207 (1972).
- [5] N. Wiberg, E. Wiberg, A. Holleman, *Lehrbuch der Anorganischen Chemie., Walter de Gruyter. 102. Auflage*, 2003 (2007).

**ОЦІНКА ЕФЕКТИВНОСТІ МЕТОДІВ ВИЛУГОВУВАННЯ Zn ТА Mn ІЗ ВІДПРАЦЬОВАНИХ ЛУЖНИХ БАТАРЕЙОК ДЛЯ ПОДАЛЬШОГО СИНТЕЗУ ХЕЛАТНИХ СПОЛУК**

Крячков Д.О., Уймин А.О., Груздева О.В.

Український державний університет науки і технологій  
ННІ «Український державний хіміко-технологічний університет»  
49005, м. Дніпро, пр. Гагаріна, 8

E-mail: [krachkow@gmail.com](mailto:krachkow@gmail.com), [gruzdeva76lena@gmail.com](mailto:gruzdeva76lena@gmail.com)

Проблема накопичення та переробки відпрацьованих джерел живлення в Україні є однією з найбільш актуальних екологічних та економічних викликів. Через відсутність відповідної інфраструктури утилізації або переробки, відпрацьовані батарейки накопичуються на полігонах, розкладаються разом із іншим сміттям та потрапляючи у довкілля, забруднюють ґрунт і воду важкими металами. У той же час, дефіцит мінеральних ресурсів, зростання цін на добрива і необхідність сталого розвитку сільського господарства вимагають нових джерел мікроелементів [1, 2]. Відпрацьовані лужні батарейки є джерелом вторинної сировини, зокрема оксидів цинку та марганцю, які можна використовувати для виробництва хелатних добрив. Останні характеризуються високою біодоступністю мікроелементів та ефективністю їх засвоєння рослинами. З огляду на це, розробка ефективних методів вилучення Zn і Mn з джерел живлення та їх подальше перетворення у комплексну сполуку є надзвичайно актуальною.

Мета дослідження - експериментальна оцінка ефективності різних методів вилуговування цинку та марганцю з твердої вуглецевмісної маси відпрацьованих лужних батарейок як підготовчого етапу для подальшого синтезу хелатних сполук. Основними завданнями дослідження є: дослідити вплив концентрації реагентів, температури та співвідношення твердої і рідкої фаз на ступінь вилучення цинку та марганцю; визначити оптимальні умови кислотно-окисного вилуговування як базової технології для попередньої підготовки хелатоутворюючої сировини.

Процес розділення джерел живлення включав наступні основні етапи:

1. Підготовка. Збір та подрібнення батарейок для збільшення поверхні контакту.
2. Вилуговування. Обробка подрібнених матеріалів кислотними розчинами для вилучення потрібних металів.
3. Фільтрація. Виділення рідкої фази, яка міститиме розчинені метали від вуглецю.
4. Оцінка ефективності вилучення металів у розчинній формі.

Перший етап. Для дослідження були вибрані лужні батарейки, які не містять важких металів, таких як Cd, Hg та Pb, щоб уникнути необхідності

подальшого їх відокремлення з розчинів і запобігти подальшого забрудненню ґрунтів та рослинності. Джерела живлення були подрібнені з подальшим розділенням твердої вуглецевмісної фракції від металевих та паперових компонентів. Для підтвердження відсутності важких металів було зроблено аналіз фазового складу твердої вуглецевмісної маси за допомогою рентгенівської дифракції, який підтвердив відсутність токсичних та шкідливих речовин та наявність оксидів марганцю –  $MnO_2$ ,  $Mn_3O_4$ ,  $Mn_2O_3$  та оксиду цинку –  $ZnO$ , що є основними цільовими компонентами.

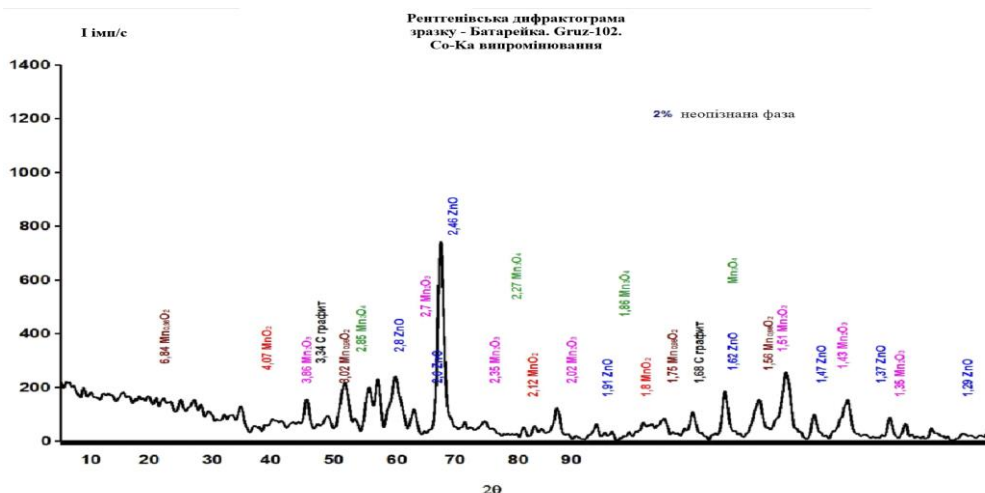


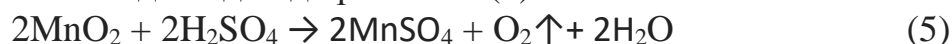
Рисунок 1 – Рентгенівська дифрактограма твердої вуглецевмісної маси лужних батарейок

Другий етап. Згідно з даними наукової літератури, вилучення цинку та марганцю з твердої вуглецевмісної маси може здійснюватися шляхом застосування гідрометалургійних або пірометалургійних технологій [3]. Після порівняльного аналізу ефективності, енерговитрат, екологічної безпечності та технологічної доцільності обох підходів, було обрано класичний гідрометалургійний процес. В основі методу лежить кислотне вилуговування металів за допомогою сірчаної кислоти, внаслідок чого утворюються розчинні сульфати цинку та марганцю —  $ZnSO_4$  та  $MnSO_4$  відповідно [4-7]:



Оскільки  $MnO_2$  нерозчинний у сірчаній кислоті, було використано декілька варіантів переведення  $MnO_2$  у розчинну сполуку:

1. Обробка твердої вуглецевмісної маси гарячою концентрованою сульфатною кислотою відповідно до рівняння (5):



2. Обробка твердої вуглецевмісної маси сульфатній кислоті при тривалому нагріванні суміші відповідно до рівняння (6):



3. Обробка твердої вуглецевмісної маси у сульфатній кислоті у присутності сильного окисника (7):



Визначення вмісту цинку та марганцю у вихідній твердій масі, а також у розчинах, отриманих після кислотного вилуговування, здійснювалося відповідно до стандартних аналітичних методик. Кількісне визначення цинку проводили методом комплексонометричного титрування із застосуванням трилону Б у присутності індикатора ксиленового помаранчевого [8]. Вміст марганцю плануємо визначати окисно-відновним методом, що базується на окисненні іонів Mn(II) до Mn(VII) за допомогою бісмутату натрію (NaBiO<sub>3</sub>) при кип'ятінні згідно з реакцією:



Після цього утворені перманганат-іони титрувались розчином солі Мора, яка відновлює MnO<sub>4</sub><sup>-</sup> до Mn<sup>2+</sup>.

Було проведено оцінку ефективності одночасного вилучення цинку та марганцю з твердої вуглецевмісної маси. Експериментальні дослідження показали, що найвищий вихід іонів цинку (97,47%) досягається за умов комбінованого вилуговування із застосуванням 3% розчину H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> з 2% H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>. Оптимальними технологічними параметрами встановлено температуру 60 °C та співвідношення твердої і рідкої фаз (S/L) = 1:30, подальший етап дослідження має на меті визначення оптимальних температур для максимального вилучення як цинку так і мангану.

#### **Список використаних джерел:**

1. Regulation (EU) 2023/1542 of the European Parliament and of the Council of 12 July 2023 Concerning Batteries and Waste Batteries. Офіційний журнал ЄС. URL: <https://eur-lex.europa.eu/eli/reg/2023/1542/oj>
2. Hasan M.A., Hossain R., Sahajwalla V. Critical metals recovery from battery waste: a review. *Process Saf. Environ. Prot.*, 2023, 178, 976–994.
3. Veloso L.R.S. et al. Hydrometallurgical recovery of Zn and Mn. *J. Power Sources*, 2005, 152, 295–302.
4. Ferella F. et al. Recycling of spent batteries. *J. Power Sources*, 2008, 183, 805–811.
5. Salgado A.L. et al. Extraction of zinc and manganese. *J. Power Sources*, 2003, 115(2), 367–373.
6. Gallegos M.V. et al. Biogenerated acid in battery metal recovery. *JOM*, 2018, 70(10), 2351–2358.
7. Tran L.H. et al. Hydrometallurgical evaluation for Zn/Mn. *Metals*, 2020, 10(9), 1175.
8. Гапута А. Мікроелементи у сільському господарстві. *Agricultural Chemistry*, 2020, 12(4), 30–37.

**ДОСЛІДЖЕННЯ ДЕЯКИХ ЕЛЕКТРОКІНЕТИЧНИХ  
ВЛАСТИВОСТЕЙ СИСТЕМИ  $Mn^{2+}$ –МАЛЕЇНОВА КИСЛОТА**  
Вальцингер К. О., Плясовська К. А. \*, Полонський В. А., Варгалюк В. Ф.  
Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара,  
пр. Науки, 72, 49010, Дніпро, Україна  
rea041975@gmail.com

Оксид мангану (IV) ( $MnO_2$ ) тривалий час привертає увагу дослідників завдяки комплексу виняткових фізико-хімічних властивостей, що обумовлює його широку функціональність у різних технологічних застосуваннях. Значну частину сучасного попиту на дану сполуку становить її використання в системах зберігання електроенергії, зокрема у високоефективних акумуляторах та суперконденсаторах. Крім того,  $MnO_2$ , як у вигляді чистого оксиду, так і в складі багатокомпонентних композицій, активно використовується як каталізатор у різноманітних хімічних процесах. Серед існуючих методів синтезу даної сполуки особливої уваги заслуговує анодне осадження з розчинів солей  $Mn^{2+}$ , яке забезпечує формування тонких, щільних плівкових покриттів на електропровідних підкладках, що є ключовою перевагою цього підходу.

Відомі методики анодного осадження діоксиду марганцю з сульфатних, перхлоратних, ацетатних електролітів [1]. Але останнім часом все більше уваги привертають електроліти із вмістом ненасичених карбонових кислот: акрилової та малеїнової. Осади, отримані з зазначених електролітів, мають більшу механічну стійкість, вищу каталітичну активність та кращі морфологічні характеристики, ніж плівки, електроосаджені з перхлоратних, сульфатних або ацетатних електролітів [1-3]. Механізми процесів у акрилатних електролітах  $Mn^{2+}$  вивчені досить детально, хоча і залишаються дискусійними, але для аналогічних малеїнатних електролітів дані відсутні. Отримання таких даних і стало задачею нашого дослідження.

Для реєстрації *i*,*E*-кривих використовували потенціостат ПИ-50-1 та стандартну триелектродну комірку. Робочі електроди – сталевий або платиновий, допоміжний – платиновий. У якості електрода порівняння застосовували насичений хлоридносрібний електрод (Ag/AgCl). На рис. 1 наведені потенціодинамічні вольт-амперні залежності, зареєстровані на платиновому електроді в електроліті складу 0,1 М Mn<sup>2+</sup>, 1 М KClO<sub>4</sub>, 0,3 М малеїнової кислоти (рН = 3,5) [3] за температури електроліту 20 °С.

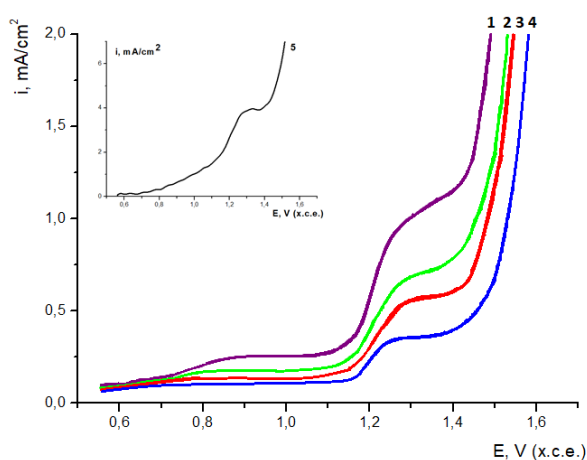


Рис. 1. Потенціодинамічні *i*,*E*-залежності, виміряні на Pt електроді у розчині складу 0.1 Mn<sup>2+</sup>, 1 М KClO<sub>4</sub>, 0,3 М малеїнової кислоти (рН = 3,5) за різних *V*(мВ/с): 1 – 5; 2- 10; 3 – 20; 4 – 50; 5 – 500

Залежності мають вигляд, східний з аналогічними залежностями для акрілатних електролітів [1]. Але критерій Семерано, визначений в роботі [1], становив 0,41, а знайдений нами для малеїнатного електроліту – 0,53 (рис. 2).

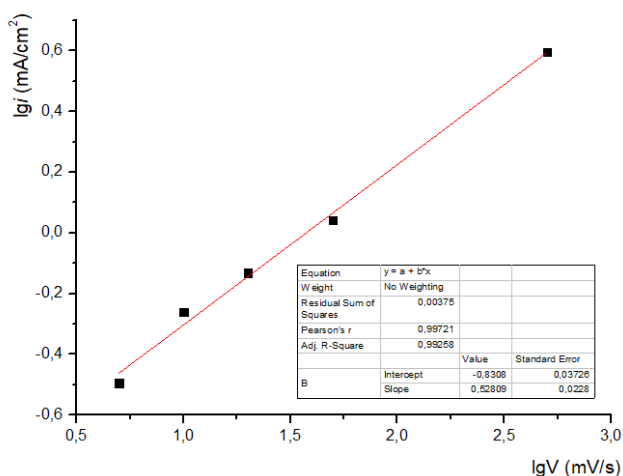


Рис. 2. Залежність струму піка від швидкості розгортки потенціалу в логарифмічних координатах за даними рис. 1

Це свідчить про дифузійний контроль електродного процесу та його необоротність у малеїнатному електроліті, на відміну від процесу в акрілатному електроліті. Це також підтверджується виглядом циклічних вольт-амперних залежностей (рис. 3). Вигляд першого циклу (рис. 3 кр. 1) змінюється, зникає максимум за  $E = 1,25$  В (рис. 3 кр. 2), і подальші цикли точно відтворюються, що вказує на необоротні зміни поверхні електроду.

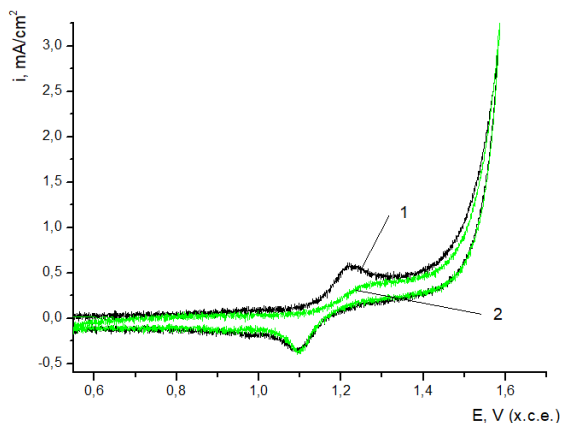


Рис. 3. Циклічні вольт-амперограми, виміряні на Pt-електроді в електроліті складу  $0.1 \text{ Mn}^{2+}$ ,  $1 \text{ M KClO}_4$ ,  $0,3 \text{ M}$  малеїнової кислоти ( $\text{pH} = 3,5$ ), швидкість розгортки потенціалу  $10 \text{ мВ/с}$

Таким чином, механізм електроокиснення мангану в малеїнатних електролітах може суттєво відрізнятися від вже відомих, але це потребує детальніших досліджень.

#### Використана література

1. Полтавець В. В. Електрохімічне формування та властивості електродних матеріалів на основі  $\text{MnO}_2$ : дис. ... канд. хім. наук: 02.00.05 – електрохімія / Дніпровський нац. ун-т ім. О. Гончара, Держ. вищ. навч. закл. «Укр. держ. хіміко-технолог. ун-т» М-ва освіти і науки України. – Дніпро, 2019. – 147 с.
2. Vargalyuk V.F., Seredyuk V.A., Pliavska K.A., Kuchai I. M. Influence of unsaturated organic acid anions on the process of electrooxidation of manganese aquacomplexes (II) // Journal of Chemistry and Technologies – 2022. – 30(3). – P. 378-385. <https://doi.org/10.15421/jchemtech.v30i3.265467>
3. Кучай І. М., Плясовська К. А., Варгалюк В. Ф. Особливості електрохімічного осадження плівок на основі малеїнової кислоти та  $\text{Mn}^{2+}$ // XXI Всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань сучасної хімії, 2023. – С. 76–78.

## **ДОСЛІДЖЕННЯ РОЗЧИННОСТІ ФУМАРОВОЇ КИСЛОТИ В ВОДНО-СПИРТОВИХ СУМІШАХ**

Савченко Є. О.<sup>1</sup>, Вальцингер К.О.<sup>2</sup> Плясовська К. А.<sup>2\*</sup>

<sup>1</sup>Комунальний позашкільний навчальний заклад «Мала академія наук учнівської молоді» Дніпропетровської обласної ради», наукове відділення хімії та біології, секція: хімія

<sup>2</sup>Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара,  
пр. Науки, 72, 49010, Дніпро, Україна  
rea041975@gmail.com

Останнім часом активізувалися інтенсивні дослідження нових матеріалів, синтезованих на основі перехідних металів (зокрема Cu, Mn тощо) та ненасичених карбонових кислот. Зокрема, тонкі плівки на основі діоксиду марганцю мають широкий спектр застосувань:

– як електродний матеріал у літій-іонних і літієвих батареях завдяки їх високій ємності та стабільності під час багаторазових циклів зарядки-розрядки; у гнучких джерелах енергії, зокрема в суперконденсаторах, що доведено в дослідженнях їх електрохімічних властивостей [1-3];

– у формі гранул або плівок – у системах знезалізнення й видалення йонів важких металів та сірководню з води; на їх основі створені матеріали, такі як RuO<sub>2</sub>, що застосовуються для очищення води у побутових і промислових установках [1, 4];

– наноплівки на основі діоксиду марганцю використовуються як чутливі елементи в сенсорах для детекції газів і токсичних речовин, а також як каталізатори в хімічних реакціях завдяки їх здатності до окиснення і високій активності у нанорозмірному стані [4].

Особливий науковий інтерес викликали сполуки оксидів марганцю з акриловою та малеїною кислотами, які вже продемонстрували перспективні результати [5-6]. Натомість фумарова кислота – транс-ізомер малеїнової – поки що майже не використовувалась через її низьку розчинність. Водночас квантово-хімічні розрахунки [7] засвідчили значний потенціал фумарової кислоти як ліганда для комплексів перехідних

металів. У зв'язку з цим актуальною науковою задачею є пошук ефективних методів підвищення її розчинності.

Одним зі способів є заміна розчинника. Підходящими розчинниками можуть бути спирти, в яких розчинність фумарової кислоти значно вища, ніж у воді. Але разом з тим доведено, що молекули води великою мірою визначають властивості отримуваних металорганічних комплексів, і оптимальним варіантом можуть бути водно-спиртові суміші: вода сильніший ліганд, ніж етанол, тому малоймовірно, що останній зможе витіснити її з координаційної сфери.

Оскільки в літературі достовірні данні відсутні, розчинність фумарової кислоти в водно-спиртових сумішах було досліджено за допомогою кондуктометричного методу. Дисоціація слабкого електроліту приводить до зниження опору розчину та відповідного зростання електропровідності. Після досягнення стану насичення розчину концентрація йонів стабілізується або збільшується дуже повільно. На графіку, що відображає залежність питомої електропровідності від розчинності кислоти, з'являється характерний перегин – він і вказує на межу розчинності. Фумарова кислота, як представниця органічних кислот, є слабкою, тому в розчині встановлюється рівновага, а йонна асоціація майже не спостерігається.

Кондуктометричні вимірювання проводили за допомогою реохордного мосту Р38 і стандартної посудина Арреніуса згідно з відомою методикою [8] за температури 20 °С. Розрахунки розчинності проведені з урахуванням густини водно-спиртових розчинів. Результати досліджень наведені в Таблиці.

Коректність обраного методу доведена порівнянням визначених та довідникових даних щодо розчинності для відомих систем за температури

20 °С. Для чистої води похибка відносно довідникового значення склала 1,5 %.

Таблиця – Розчинність фумарової кислоти (г/100 г розчинника) в водно-спиртових сумішах

Співвідношення води та етанолу (95 %)	100 : 0	75 : 25	50 : 50	25 : 75	0 : 100
Розчинність, г/100 г розчинника	0,62	0,80	0,94	1,15	1,25

Визначено, що можна вважати перспективним використання для практичних цілей (електроосадження плівок на основі  $Mn^{2+}$  – фумарова кислота) розчинника складу 75 % спирту, 25 % води (встановлена розчинність – 1,15 г/100 г розчинника, що в 1,85 разів вище, ніж у воді). В 95 %-му розчині етанолу розчинність фумарової кислоти вища (1,35 г/100 г розчинника), але його опір настільки високий, що це може викликати певні проблеми під час електролізу.

#### Використана література

4. Sivakumar M., Kanakarajan P., Jeevanantham V. Pure  $MnO_2$ ,  $Ni/MnO_2$ ,  $Ni/MnO_2@PVA$  and  $Ni/MnO_2@PVP$  polymetric nanocomposites for energy storage device // Journal of Ovonic Research. – 2024. – Vol. 20. – № 2. – P. 201–207. DOI: [10.15251/JOR.2024.202.201](https://doi.org/10.15251/JOR.2024.202.201)
5. Su X., Liang Z., He Q., Guo Ya., Luo G., Han Sh., Yu L. Advanced three-dimensional hierarchical porous  $\alpha$ - $MnO_2$  nanowires network toward enhanced supercapacitive performance // Nanotechnology. –

2024. – Vol. 35. – № 26. – а. н. 265402. DOI: [10.1088/1361-6528/ac4cf0](https://doi.org/10.1088/1361-6528/ac4cf0)
6. Vidyalakshmi Y., Vaishali M. S., Geetha D. Synthesis and supercapacitor performance of  $\text{Sm}_3\text{RuO}_7$  nanorods and  $\text{Sm}_3\text{RuO}_7/\text{MnO}_2$  nanocomposite // Journal of Materials Science: Materials in Electronics. – 2024. – Vol. 35. – а. н. 510. DOI: [10.1007/s10854-024-12191-6](https://doi.org/10.1007/s10854-024-12191-6)
  7. Гайдамашко О. Революційні винаходи 2020 року, що увійдуть в історію. [Електронний ресурс]. – Режим доступу: [https://24tv.ua/tech/revolyutsiyni-vinahodi-2020-roku-uviydut-v-istoriyu\\_n1479617](https://24tv.ua/tech/revolyutsiyni-vinahodi-2020-roku-uviydut-v-istoriyu_n1479617)
  8. Полтавець В. В. Електрохімічне формування та властивості електродних матеріалів на основі  $\text{MnO}_2$ : дис. ... канд. хім. наук: 02.00.05 – електрохімія / Дніпровський нац. ун-т ім. О. Гончара, Держ. вищ. навч. закл. «Укр. держ. хіміко-технолог. ун-т» М-ва освіти і науки України. – Дніпро, 2019. – 147 с.
  9. Кучай І. М., Плясовська К. А., Варгалюк В. Ф. Особливості електрохімічного осадження плівок на основі малеїнової кислоти та  $\text{Mn}^{2+}$ // XXI Всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань сучасної хімії, 2023. – С. 76–78.
  10. Борщевич Л. В., Варгалюк В. Ф., Бут Т. О., Стець Н. В., Плясовська К. А. Електровідновлення аквакомплексів кобальту (II) в присутності акрилової кислоти // Journal of Chemistry and Technologies. – 2024. – 32(4). – С. 880-886.  
<https://doi.org/10.15421/jchemtech.v32i4.316572>
  11. Загальний лабораторний практикум із фізичної хімії. Електрохімія. Кінетика. / Упорядн. Плясовська К. А., Медведєва І. А., Юрченко Н. П., Кудрін Ю. С. – Дніпропетровськ: Вид-во ДНУ, 2006. – 64 с.

**ДОСЛІДЖЕННЯ СОРБЕНТІВ БІОМЕДИЧНОГО  
ПРИЗНАЧЕННЯ ЗА ДОПОМОГОЮ ІЧ-СПЕКТРОСКОПІЇ**

Токар А.В., Водолазська М.В.

Дніпровський державний аграрно-економічний університет  
вул. Сергія Єфремова, 25, 49009, м. Дніпро

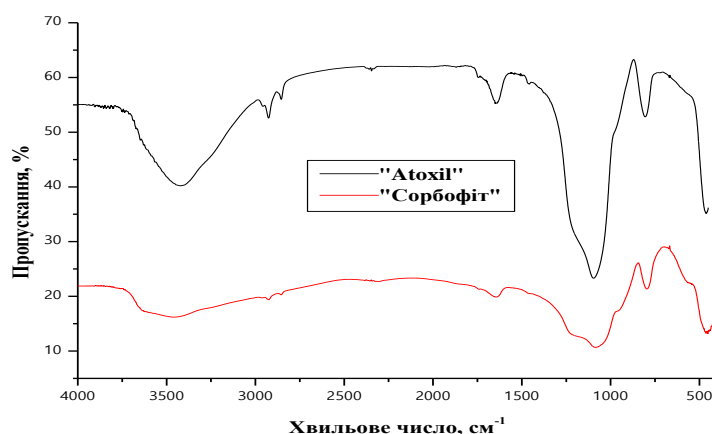
[atokar\\_2004@ukr.net](mailto:atokar_2004@ukr.net)

Інфрачервона спектроскопія відкриває широкі можливості для вивчення особливостей будови різноманітних матеріалів та дозволяє здійснювати їх структурування як на якісному, так й кількісному рівні, у зв'язку із чим є цінним методом аналітичного визначення складу та ідентифікації природи речовини. У межах даної роботи цей метод було активно застосовано, перш за все, для надання порівняльної характеристики сорбентів різних типів, що мають цінні властивості та високу адсорбційну здатність по відношенню до сполук органічно-мінерального походження, а також вивчення складу деяких сорбційних систем, у тому числі й біомедичного призначення.

В якості об'єктів дослідження нами було обрано зразки типового ентеросорбенту «Атохіл» ТОВ «Орісіл-Фарм», що містив чистий силіцій діоксид високого ступеня дисперсності, а також дієтичної добавки «Сорбофіт», як його ще іноді називають «Білий сорбент» від виробника «Індустрія здоров'я», що крім базового компонента у кількості ~40% SiO<sub>2</sub> за масою містив й деякі допоміжні речовини: целюлозу, лактозу, крохмаль та кальцій стеарат. Препарат «Активне вугілля» ТОВ «ОКСІД» й ПП «ФІТОБАД» у вигляді дієтичної добавки в якості домішок також містив тальк. Особливої уваги заслуговує етиленовий абсорбент від компанії «Green Кеерер», який є стійким до дії вологи та безпечним при контакті з продуктами харчування.

Предметом дослідження стало вивчення характеристичних смуг поглинання коливальних спектрів вказаних матеріалів з метою попередньої оцінки ступеня їх чистоти, а також визначення принципів

можливостей щодо подальшого поєднання у складі комплексного сорбенту, зокрема карбосилікагелю, з точки зору встановлених раніше його особливостей. Інфрачервоні спектри сорбуючих речовин було записано на приладі SPECTRUM ONE (PerkinElmer). Зразки для запису приготовано за стандартною методикою із калій бромідом. Ефективний діаметр таблеток становив близько 12 мм з їх товщиною приблизно 1 мм. У цьому випадку був доцільним вміст тонкого порошку досліджуваних матеріалів у кількості не більше 3% за масою. Водночас, варіювання вмісту цільового компонента в межах до 1–2 мас.% у цілому продемонструвало стійке відтворення положень окремих сигналів в спектрах та дозволило значною мірою уніфікувати їх розгляд на прикладі типових залежностей, наведених у випадку силікагелю на рис. 1.



**Рис. 1. Типові ІЧ коливальні спектри силікагелю**

З цієї точки зору принципового значення набуває якісна ідентифікація сигналів силікагелю, що представлені широкою та інтенсивною смугою в області 1090 см<sup>-1</sup>, а також вузькими смугами поглинання меншої інтенсивності при 780 та 460 см<sup>-1</sup>. Причому, у першому випадку переважають внески валентних коливань окремих зв'язків  $\nu(\text{SiO})$ , а у другому – деформаційних коливань  $\delta(\text{OH})$  та  $\delta(\text{SiO})$  в умовах ефективного водневого зв'язування. Слід зауважити, що валентні коливання

гідроксильних груп  $\nu(\text{OH})$  також можуть знаходити своє відображення на ділянці спектру  $3405\text{--}3419\text{ см}^{-1}$ , яка зазвичай відповідає за присутність слідових кількостей води у досліджуваних зразках. Одержані результати цілком узгоджуються із літературними даними щодо високої гідрофільності поверхні часток силікагелю, розмір яких за умов насипної щільності у  $0,3\text{--}0,6\text{ г/см}^3$  зазвичай становить не більше  $5\text{--}10\text{ мкм}$ .

Продовженням нашого дослідження стало вивчення спектрів поглинання «активного» вугілля з метою визначення характеристичних сигналів, їх положення та інтенсивності, які є типовими для цих матеріалів. На відміну від силікагелю, який має чітко визначену хімічну структуру, вугільна речовина являє собою надзвичайно складну систему, будова якої у значній мірі залежить від походження вугілля, способів його одержання та умов карбонізації органічних сполук, й безумовно потребує уточнення з точки зору структурної інтерпретації. Дійсно, джерелом вугільної речовини у цьому випадку доволі часто може слугувати саме деревне вугілля, що утворюється шляхом відпалу або піролізу деревини за відсутності повітря із подальшою обробкою парами води при високих температурах. Беручи до уваги останнє, нами було запропоновано методологічний підхід до розшифрування коливальних спектрів «активного» вугілля, ключова ідея якого полягала у пошуку та зіставленні його характеристичних сигналів з аналогічними величинами для якогось-небудь прототипу – матеріалу рослинного походження з більш високим «рівнем» хімічного структурування. Зручною з цієї точки зору є модельна сполука добре відомого аморфного біополімеру лігніну. Типові ІЧ коливальні спектри цього рослинного матеріалу представлено на рис. 2.

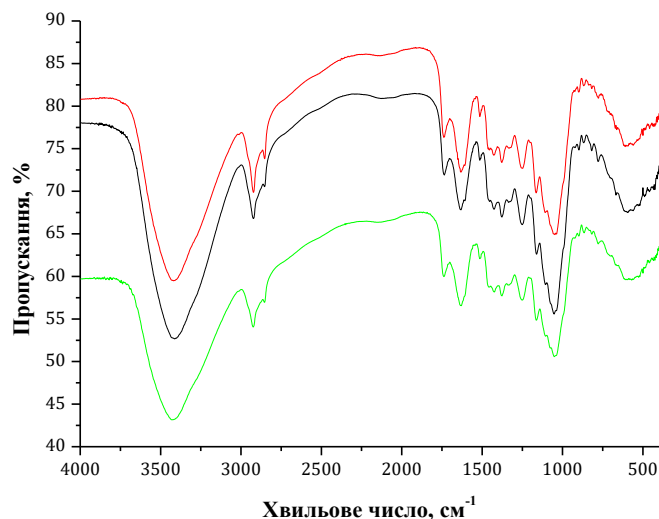


Рис. 2. Типові ІЧ коливальні спектри нативного лігніну

Порівняльний аналіз одержаних результатів показав, що найбільш інтенсивні смуги поглинання знаходяться при 3417–3438 та  $\sim 1070$   $\text{cm}^{-1}$ . У першому випадку переважно мають справу з валентними коливаннями стерично ускладнених гідроксильних груп  $\nu(\text{OH})$ , що присутні у системах із міцними водневими зв'язками, у другому – з інтенсивними валентними коливаннями простих карбон-оксигенових зв'язків  $\nu(\text{CO})$  зі значним внеском ефектів внутрішньомолекулярного водневого зв'язування. Також встановлено наявність двох типових валентних коливань ароматичного фрагменту молекул  $\nu(\text{CC})$  при 1647 та 1520  $\text{cm}^{-1}$ .

Що ж стосується препаратів «активного» вугілля, то тут варто зазначити цілковиту відсутність навіть слідових кількостей вологи, що вказує на значну гідрофобність поверхні цього матеріалу, адже в області  $\sim 3450$   $\text{cm}^{-1}$  характеристичні смуги коливань не спостерігаються. Натомість яскраво вираженими сигналами залишаються уширені піки поліциклічних ароматичних систем поблизу від 1500–1650  $\text{cm}^{-1}$ , а також коливання аліфатичних карбонових ланцюгів.

Завершальним етапом нашого дослідження стало вивчення особливостей складу та механізму дії іншого комплексного абсорбенту, зокрема етиленового поглинача від компанії «Green Keeper», застосування якого є цілком виправданим під час зберігання та транспортування рослинної продукції. Останній виготовляється з високопористого мінерального матеріалу (філосилікату та алюмосилікату), що слугує основою для наповнювача  $\text{KMnO}_4$ , збільшуючи його контактну поверхню з повітрям. Коливальний спектр цієї композиції наведено на рис. 3.

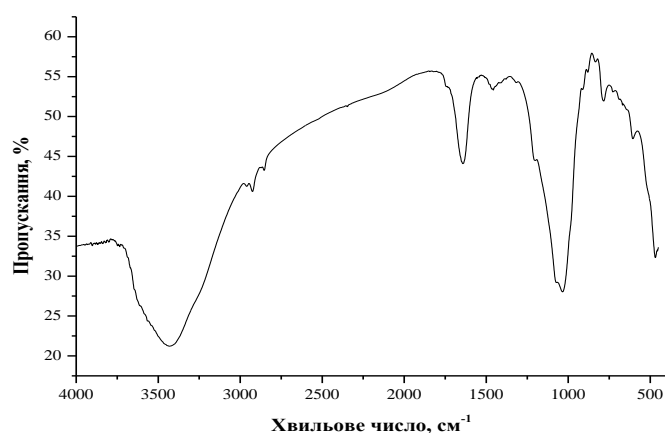


Рис. 3. Типовий ІЧ коливальний спектр алюмо/філосилікату

Порівняльний аналіз характеристичних сигналів, їх положення та інтенсивності з отриманими раніше даними, зокрема для силікагелю (рис. 1), свідчить про споріднений характер цих матеріалів та дозволяє виділити окремі валентні коливання  $\nu(\text{SiOAl})$ , що лежать в області 625–750  $\text{cm}^{-1}$ . Проведене додатково перманганатометричне визначення цільового компоненту показало присутність  $\text{KMnO}_4$  у кількості, що не перевищує ~1,5 мас.% та цілком задовольняє сучасним вимогам, які висуваються до органічної сільськогосподарської продукції.

**КОРОЗІЙНІ І ЕЛЕКТРОХІМІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ  
ВИСОКОЕНТРОПІЙНИХ СПЛАВІВ  $\text{Cu}_5\text{FeNiMnAlSi}$  ТА  
 $\text{Cu}_5\text{FeNiMnAlCr}$**

Третяк В.С., Полонський В.А., Кушнерьов О.І.

*Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара,*

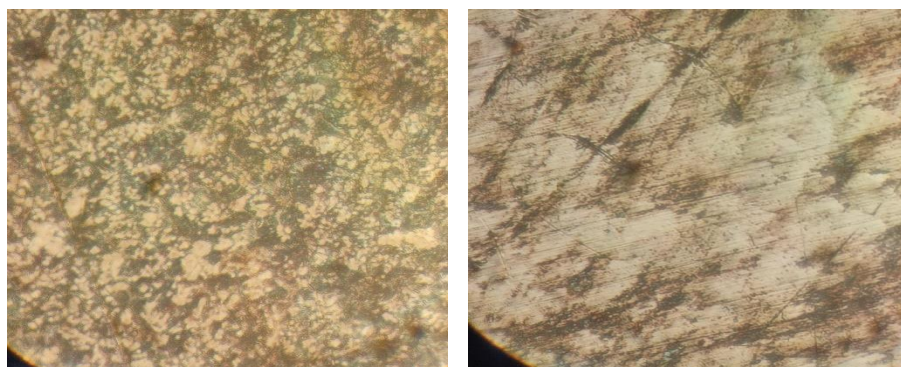
*49010, м. Дніпро, пр-т Науки, 72*

*e-mail: tretakvladislav04@gmail.com*

Корозійні процеси, що виникають під час експлуатації матеріалів в умовах агресивних середовищ, здатні суттєво впливати на нормальне функціонування обладнання. Зараз вважається, що корозійні втрати забирають понад 3% від світового валового внутрішнього продукту. Тому розробка матеріалів, які володіють підвищеною тривкістю до корозії є надзвичайно важливим і актуальним завданням сучасних науки і технології. Серед металічних елементів найвищу корозійну тривкість мають благородні метали, але їх використання обмежують висока вартість, низькі міцність і твердість. Більш поширеними є такі металеві матеріали, як алюмінієві сплави, неіржавіючі сталі, сплави на основі міді та нікелю. Протягом двох останніх десятиліть була розроблена концепція високоентропійних сплавів (HEA), запропонованих Yeh J.W. зі співробітниками [1, 2]. Такі типи сплавів складаються щонайменше з чотирьох елементів з концентрацією кожного між 5 та 35 атомних %. Властивості HEA визначаються їх елементним складом і структурою. Завдяки високій твердості та міцності і, одночасно, пластичності, низькій втомлюваності, високій термостабільності вони можуть бути перспективними матеріалами для багатьох галузей техніки. До складу HEA зазвичай вводять пасивуючі елементи (наприклад, такі як Ni, Al, Cr), що призводить до підвищеної корозійної тривкості порівняно зі звичайними сплавами [3].

Особливу увагу останнім часом викликають високоентропійні сплави на основі міді [4]. Взагалі латуні і бронзи є найпоширенішими групами металів. Сучасні латуні демонструють виняткове поєднання міцності, здатності до формування, довговічності, оброблюваності та стійкості до корозії [5]. Важливу роль відіграють корозійні випробування таких матеріалів [6, 7]. Тому метою роботи стало дослідження електрохімічної та корозійної поведінки зразків високоентропійних латуней систем Cu–Fe–Ni–Mn–Al–Si та Cu–Fe–Ni–Mn–Al–Cr у нейтральному розчині натрій хлориду. Литі зразки сплавів отримувалися в високотемпературній електропечі Таммана з застосуванням потоку аргону. Робоча поверхня зразків шліфувалась і потім полірувалась до дзеркального блиску, інші

поверхні ретельно ізолювались лаком ХВЛ та тефлоновою стрічкою. Стан поверхні до та після випробувань контролювався під мікроскопом при різних збільшеннях. Модельні корозійні дослідження зразків сплавів була проведена шляхом їх повного занурення у 3,5% розчин NaCl з періодичним контролем маси і стану поверхні через 1, 2, 4 та 8 діб від початку експерименту. Як з'ясувалось, обидва сплави в процесі випробування не змінили своєї маси, а на їх поверхні лише з'явилися незначні кольори мінливості (рис.1).



Cu-Fe-Ni-Mn-Al-Si

Cu-Fe-Ni-Mn-Al-Cr

Рисунок 1 – Стан поверхні зразків через 8 діб корозійних випробувань, x1000

Електрохімічні дослідження виконані за допомогою потенціостата ПІ-50-1 та програматора ПР-8 з використанням трьохелектродної комірки. Допоміжним електродом слугувала платинова пластинка. Електродом порівняння був хлоридсрібний напівелемент. Температура розчинів під час експериментів  $25 \pm 2^\circ\text{C}$ . В ході вимірювань розчин не перемішувався.

Величини стаціонарних потенціалів ( $E_{\text{ст}}$ ) сплавів визначались шляхом довготривалої реєстрації  $E, \tau$ -залежності до отримання незмінного значення потенціалу. Отримані результати наведені на рис.2.

Як видно, після години вимірювань зразок сплаву Cu-Fe-Ni-Mn-Al-Cr мав практично незмінне значення  $E_{\text{ст}}$  (-0,21 В), а у зразка сплаву Cu-Fe-Ni-Mn-Al-Si значення  $E_{\text{ст}}$  поступово дещо зміщувалось до більш позитивних значень (-0,17 В). Достатньо малі значення отриманих величин  $E_{\text{ст}}$  і їх певна стабільність вказують на інертну поведінку випробуваних сплавів у нейтральному середовищі. Це цілком корелює з результатами корозійних випробувань.

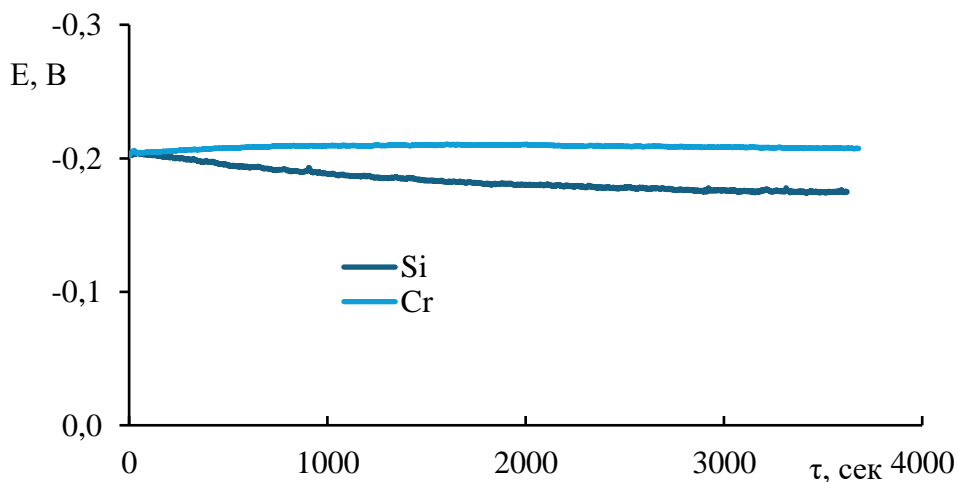


Рисунок 2 – E,τ-залежності сплавів Cu–Fe–Ni–Mn–Al–Si та Cu–Fe–Ni–Mn–Al–Cr у 3,5% розчині NaCl; pH=7,0.

Поляризаційні дослідження виконані з метою визначення зон електрохімічної інертності досліджених зразків сплавів. Швидкість розгортки потенціалу була 1 мВ/с. Результати вимірювань наведені на рис. 3 та рис. 4.

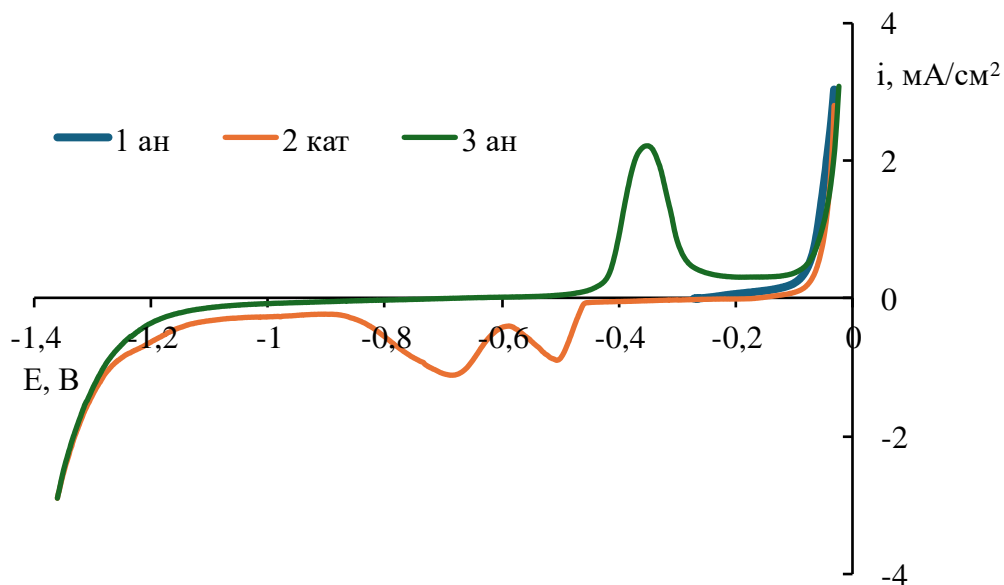


Рисунок 3 – Циклічна поляризаційна залежність, отримана для сплаву Cu–Fe–Ni–Mn–Al–Si у 3,5% розчині NaCl; pH=7,0.

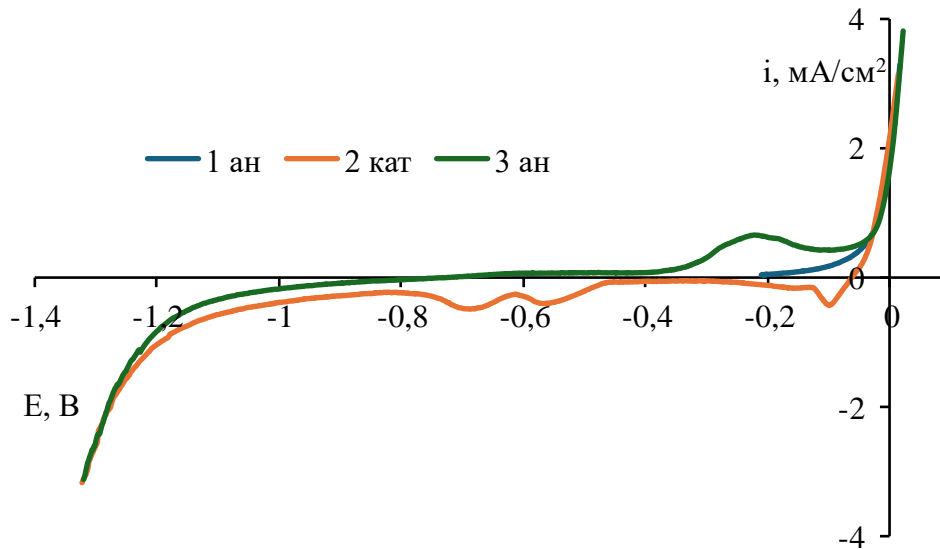


Рисунок 4 – Циклічна поляризаційна залежність, отримана для сплаву Cu–Fe–Ni–Mn–Al–Cr у 3,5% розчині NaCl; pH=7,0.

Спираючись на форму  $i$ ,  $E$  – залежності, отриманої для 3-го циклу розгортки потенціалу, можна стверджувати, що для сплаву Cu–Fe–Ni–Mn–Al–Si зона електрохімічної інертності знаходиться в межах від  $-0,45$  В до  $-1,10$  В. Для сплаву Cu–Fe–Ni–Mn–Al–Cr вона дещо ширша – від  $-0,35$  В до  $-0,10$  В.

Отримані результати дозволяють вважати випробувані зразки високоентропійних латуней достатньо корозійно тривкими в нейтральних середовищах.

#### Список використаних джерел

1. Yeh, J. W. Nanostructured high-entropy alloys with multiple principal elements: novel alloy design concepts and outcomes. / Yeh, J. W., S.-K. Chen, S.-J. Lin, J.-Y. Gan, T.-S. Chin, T.-T. Shun, C.-H. Tsau, S.-Y. Chang // *Advanced engineering materials*. – 2004. – Vol. 6, Iss. 5, P. 299-303. DOI: [10.1002/adem.200300567](https://doi.org/10.1002/adem.200300567)
2. Murty B.S. High-Entropy Alloys / B.S. Murty, J.W. Yeh, S. Ranganathan // Butterworth Heinemann (Elsevier). – 2014. – 218 p.
3. Cantor B. Microstructural development in equiatomic multicomponent alloys / B. Cantor, I.T.H. Chang, P. Knight, A.J.B. Vincent // *Materials Science and Engineering*. – 2004. – V. 375. – P. 213–218. <https://doi.org/10.1016/j.msea.2003.10.257>
4. Laws K. High entropy brasses and bronzes – Microstructure, phase evolution and properties / K. Laws, C. Crosby, A. Sridhar, P. Conway, L. S. Kolodkin, Mo Zhao, S. Aron-Dine, L. C. Bassman // *Journal of Alloys and Compounds*. – 2015. – V. 650. – P. – 949-961 <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2015.07.285>

*XXIII Всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань сучасної хімії, Дніпро, 19-22 травня 2025 р.*

5. Davis J. R. Copper and copper alloys. ASM Specialty Handbook. ASM International, Materials Park, OH. – 2001. – 652 p.

6. Qiu Y. Corrosion of high entropy alloys / Y. Qiu, S. Thomas, M. A. Gibson, H.L. Fraser , N. Birbilis // Materials Degradation.– 2017. – P. 1–7. <https://doi:10.1038/s41529-017-0009-y>

7. Yongchao Yang The Evolution of Corrosion and Electrochemical Behaviour of High Entropy Brasses and Bronzes // Thesis for: Master by research. Faculty of Science University of New South Wales. – 2019. – 125 p. [https://www.researchgate.net/publication/346515652\\_The\\_Evolution\\_of\\_Corrosion\\_and\\_Electrochemical\\_Behaviour\\_of\\_High\\_Entropy\\_Brasses\\_and\\_Bronzes](https://www.researchgate.net/publication/346515652_The_Evolution_of_Corrosion_and_Electrochemical_Behaviour_of_High_Entropy_Brasses_and_Bronzes),

8.

# Секція

## ХАРЧОВА ХІМІЯ ТА СУЧАСНІ ХАРЧОВІ ТЕХНОЛОГІЇ

**Керівник:** доц., канд. техн. наук Кондратюк  
Наталія Вячеславівна

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

## **ВИЗНАЧЕННЯ ФЛАВОНОЇДІВ В ХАРЧОВИХ ПРОДУКТАХ**

Бондаренко В.В., Худякова С.М., Кондратюк Н.В.

Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара, 49045,

м. Дніпро пр. Науки,72

Натуральні продукти, як правило, багаті антиоксидантами, такими як вітамін С, вітамін Е, каротиноїди та поліфеноли. Поліфенольні сполуки є найпоширенішими антиоксидантами в раціоні людини і в основному присутні в їжі та напоях рослинного походження. Флавоноїди складають велику групу поліфенольних фітохімічних речовин з антиоксидантними властивостями, що проявляються шляхом прямого поглинання вільних радикалів. Відмічено важливу роль деяких продуктів (фруктів, овочів, зернових культур) у профілактиці захворювань, що визначило розвиток ринку функціональних продуктів харчування в контексті профілювання нової концепції «оптимізованого харчування». Проведені дослідження показали, що споживання продуктів, багатих на флавоноїди, може знизити ризик деяких хронічних захворювань, пов'язаних з дієтою, але високі дози певних флавоноїдів можуть мати негативні наслідки. Тому технології екстракції та виявлення відіграють ключову роль у дії флавоноїдів.

Джерела флавоноїдів часто є складними, з різними ізомерами та складною структурою. Виділення та виявлення флавоноїдів високої чистоти завжди були вузьким місцем у розробці та використанні флавоноїдів. У даний час багато передових методів екстракції, розділення та виявлення застосовуються до флавоноїдів, враховуючи як природу конкретного аналіту, так і проби, у якій він міститься. У науковій літературі достатньо вичерпно узагальнено дослідження щодо вилучення та виявлення флавоноїдів у продуктах харчування, а також застосування математичних моделей для оптимізації експериментальних умов. Результати забезпечують теоретичну основу та технічну підтримку для

*XXIII Всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань сучасної хімії, Дніпро, 19-22 травня 2025 р.*

виявлення та аналізу високочистих флавоноїдів у харчових продуктах. Багато структурно подібних флавоноїдів знаходяться в харчових продуктах в низьких концентраціях, що ускладнює їх виділення та ідентифікацію. Зазвичай кількісне визначення загального вмісту флавоноїдів (ЗВФ) широко виконується колориметрично за допомогою хлориду алюмінію. На підставі нових досліджень, проведених науковцями, доведено, що точність такого методу суттєво залежить від флавоноїдного стандарту, який використовується в процесі кількісного визначення ЗВФ. Різні флавоноїди мають різну хімічну структуру, і відмінності в їх спектрах поглинання є безперечними. У відповідних роботах було отримано неприйнятно високі або низькі помилкові результати (діапазон 33–343%) залежно від флавоноїдного стандарту, використаного в процесі кількісного визначення.

Розробка нових функціональних напоїв на основі фітоекстрактів із рослинної сировини з високим вмістом сполук-антиоксидантів, у тому числі флавоноїдів, вимагає і оцінювання її якості. При цьому вміст поліфенольних сполук, включаючи флавоноїди, впливає на фізико-хімічні та органолептичні показники не тільки фітоекстрактів, але і різноманітних функціональних продуктів харчування. Одним із основних завдань у їх розробці є створення ефективної взаємодії між корисними властивостями харчових продуктів та їхніми органолептичними якостями.

Таким чином, розробка та оптимізація ефективних методів екстракції для вилучення флавоноїдів для подальшого їх визначення є важливим. Для одержання продуктів із привабливими органолептичними властивостями, доброї якості і покращеним хімічним складом, що містять флавоноїди як харчові добавки, актуальним аналітичним завданням є розробка надійних та доступних експресних методів контролю їх вмісту як в сировині, так і в їжі.

**СУМІСНІСТЬ ОКРЕМИХ ФУНКЦІОНАЛЬНИХ ІНГРЕДІЄНТІВ ОЗДОРОВЧИХ ПРОДУКТІВ**

Кулініч М., Чернушенко О.О.

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

Для збагачення харчових продуктів слід використовувати ті мікронутрієнти, дефіцит яких місце. В умовах України це, перш за все, вітаміни С, групи В, фолієва кислота, каротин, а з мінеральних речовин: йод, залізо, кальцій, селен. Збагачувати вітамінами та мінеральними речовинами слід продукти масового споживання. До таких продуктів насамперед відносять борошно та хлібобулочні вироби, молоко та кисломолочні продукти, сіль, цукор, напої, продукти дитячого харчування.

При збагаченні харчових продуктів вітамінами і мінеральними речовинами необхідно враховувати можливість хімічної взаємодії збагачувальних добавок з компонентами продукту. Вибирати такі їх поєднання, форми, способи і стадії внесення, які забезпечують їх максимальну безпеку в процесі виробництва і зберігання. Кількість вітамінів і мінеральних речовин, що додатково вносяться в продукти, що збагачуються, повинна бути розрахована з урахуванням їх природного вмісту у вихідному продукті або сировині, що використовується для його виготовлення, а також втрат у процесі виробництва та зберігання для того, щоб забезпечити вміст цих вітамінів і мінеральних речовин на рівні не менше регламентованого протягом усього терміну придатності збагаченого продукту.

У продукти, збагачені солями заліза або іншими мікроелементами, не завжди доцільно вводити харчові волокна, здатні міцно зв'язувати ці мікроелементи, порушуючи їх всмоктування в шлунково-кишковому тракті. Борошно і хліб доцільно збагачувати вітамінами групи В, які добре переносять вплив високої температури в процесі випічки, чого не скажеш про вітамін С, що відрізняється значно меншою стійкістю. Тому при збагаченні борошна та хліба вітамін С практично не використовують. Досить важку в технологічному відношенні проблему є поєднанням в одному продукті аскорбінової кислоти з солями заліза або інших металів змінної валентності: цинку, міді тощо, що каталізують швидке її окислення зі втратою вітамінної активності. Борошно та хліб збагачують, як правило, вітамінами групи В, кальцієм та залізом. У соки та напої найчастіше додають вітамін С та водорозчинні вітаміни групи В: В<sub>1</sub>, В<sub>2</sub>, В<sub>6</sub>, В<sub>12</sub>, нікотинову, пантотенову, фолієву кислоти та біотин. Жиророзчинні вітаміни А, D, Е, К і каротин частіше додають у продукти, що містять жир: рослинне, вершкове масло, маргарин, молоко та кисломолочні продукти.

Таблиця 1

**Позитивна сумісність вітамінів і мікроелементів**

вітаміни А – Е, С	Вітаміни Е і С захищають вітамін А від окислення. Вітамін Е покращує всмоктування вітаміну А. Вітамін А знижує рівень вітаміну Е
вітамін А – йод	Ретиноева кислота бере участь у поглинанні йоду,
вітаміни В <sub>2</sub> –В <sub>6</sub> В <sub>9</sub> В <sub>3</sub> К вітаміни В <sub>3</sub> –В <sub>6</sub>	Вітамін В <sub>2</sub> необхідний для перетворення вітаміну В <sub>6</sub> , В <sub>3</sub> , В <sub>9</sub> К в активну форму, хороша сумісність
вітаміни В <sub>9</sub> –С	Сумісність вітамінів С і В <sub>9</sub> сприяє збереженню В <sub>9</sub> в тканинах
вітаміни С –Е	Вітамін С має властивість відновлювати окислений вітамін Е. Вітамін С краще засвоюється з харчових продуктів ніж з полівітамінних добавок
вітаміни В <sub>12</sub> – В <sub>5</sub> вітаміни В <sub>12</sub> – В <sub>9</sub>	Нестача одного вітаміну може призвести до недостатності іншого зі схожими симптомами
вітамін А – залізо	Вітамін А дозволяє використовувати запас заліза, що міститься в печінці, під впливом заліза відбувається перетворення β-каротину на ретинол, використання залізовмісних добавок збільшує біодоступність каротиноїдів, α-каротину, βкаротину та β-криптоксантину.
вітамін В <sub>2</sub> – цинк	Вітамін В <sub>2</sub> збільшує біодоступність цинку
вітамін В <sub>3</sub> – цинк	Вітамін В <sub>3</sub> забезпечує поліпшення рівня цинку в печінці, позитивно позначається на рівні антиоксидантних маркерів, знижує рівень глутатіону та перекисне окиснення ліпідів
вітамін В <sub>3</sub> – мідь	Вітамін В <sub>3</sub> у кілька разів покращити засвоєння. міді
вітамін В <sub>6</sub> – кальцій	Вітамін В <sub>6</sub> знижує виведення кальцію з організму
вітамін В <sub>6</sub> – магній	Вітамін В <sub>6</sub> збільшує біодоступність магнію, а магній, в свою чергу, збільшує кількість вітаміну В <sub>6</sub> , здатного проникати в клітини
вітамін В <sub>1</sub> – магній	Магній забезпечує оптимальне перетворення вітаміну В <sub>1</sub> в його біологічно активну форму, та необхідний для утворення ряду тіамін-залежних ферментів.

**XXIII Всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань сучасної хімії, Дніпро, 19-22 травня 2025 р.**

вітамін В <sub>6</sub> – цинк	Вітамін В <sub>6</sub> зменшує виведення цинку з організму з сечею
вітамін С – залізо вітамін С – хром	Вітамін С збільшує біодоступність заліза і сприяє засвоєнню хрому
вітамін D – кальцій	Вітамін D необхідний для засвоєння кальцію.
вітамін D – магній	Кальциферол сприяє поліпшенню концентрації сироваткової магнію
вітамін D – селен	покращує засвоєння селену у сироватці крові.
вітамін D – фосфор	Вітамін D покращує засвоєння фосфору в організмі
вітамін Е – селен	Антиоксидантний ефект вітаміну Е підсилюється при одночасному вживанні з селеном
вітамін К – кальцій	Вітамін К допомагає кальцію будувати кісткову тканину в організмі, позитивно впливає на функції серцево-судинної системи та скелетних тканин.
вітамін А – цинк	Цинк поліпшує засвоєння ретинолу, необхідний для транспортування в сітківку ока. Комплекс вітамін А–цинк допомагає знизити небезпеку інфекційних захворювань.
вітаміни В <sub>6</sub> –В <sub>9</sub>	Вітамін В <sub>6</sub> посилює потреби організму у фолієвій кислоті
мідь – залізо	Мідь підсилює функцію заліза
магній – кальцій	Магній сприяє засвоєнню кальцію

Таблиця 2

**Негативна сумісність вітамінів і мікроелементів**

вітаміни В <sub>1</sub> –В <sub>2</sub> , В <sub>3</sub>	Вітаміни В <sub>2</sub> і В <sub>3</sub> руйнують вітамін В <sub>1</sub>
вітаміни В <sub>1</sub> –В <sub>6</sub>	Вітамін В <sub>6</sub> інактивує В <sub>1</sub>
вітаміни В <sub>6</sub> –В <sub>12</sub>	В <sub>12</sub> сприяє руйнуванню вітаміну В <sub>6</sub>
вітаміни В <sub>1</sub> – В <sub>12</sub>	Вітаміни В <sub>12</sub> руйнує вітамін В <sub>1</sub> і підсилює алергічні реакції на нього
вітаміни В <sub>12</sub> –С, В <sub>3</sub> , А, Е	Інактивують вітамін В <sub>12</sub>
вітаміни А –К	Ретинол поруше' засвоєння вітаміну К, пригнічує синтез філлохінону кишковими бактеріями , ускладнює його

*XXIII Всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань сучасної хімії, Дніпро, 19-22 травня 2025 р.*

	печінкові функції
вітамін D – E, A	знижується поглинання організмом вітаміну D.
вітамін E – K	Токоферольні метаболіти здатні пригнічувати активність філлохінону
вітамін B <sub>9</sub> – цинк	Цинк порушує всмоктування вітаміну B <sub>9</sub> за рахунок утворення нерозчинних комплексів
вітамін E – залізо	Залізо ускладнює засвоєння токоферолу,
вітамін C – мідь	Вітамін C стимулює поглинання міді.
вітамін B <sub>2</sub> – залізо, мідь	Мідь та залізо уповільнюють засвоєння вітаміну B <sub>2</sub>
вітамін B <sub>2</sub> – кальцій	Кальцій та вітамін B <sub>2</sub> утворюють хелат, що знижує поглинання травному тракті.
залізо – кальцій, магній, цинк, хром	Кальцій, магній і цинк знижують рівень заліза, хром негативно впливає на метаболізм заліза
цинк – кальцій, мідь	Кальцій і мідь знижують засвоєння цинку в кишківнику
марганець – кальцій, залізо	Кальцій і залізо знижують засвоєння марганцю
ртуть – селен	Надлишок ртуті призводить до дефіциту селену
арсен - селен	Надлишок арсену призводить до дефіциту селену
кадмій – селен, цинк	Надлишок кадмію призводить до дефіциту селену і цинку
свинець – кальцій, магній, цинк, селен	Надлишок свинцю призводить до дефіциту кальцію, магнію, цинку і селену
кальцій – фосфор, цинк	Надлишок кальцію призводить до дефіциту фосфору і цинку
залізо – мідь, цинк	Залізо призводить до дефіциту міді і цинку
марганець – мідь, марганець – магній	Марганець призводить до дефіциту міді і магнію
молібден – мідь	Молібден призводить до дефіциту міді.
цинк – залізо, мідь	Цинк призводить до дефіциту заліза і міді
мідь – молібден, цинк	Мідь призводить до дефіциту молібдену і цинку

Поряд з медико-біологічними аспектами збагачення харчових продуктів є технологічні проблеми: збагачення харчових продуктів

мікронутрієнтами не повинно погіршувати цінність і якість цих продуктів – зменшувати вміст і засвоюваність інших харчових речовин; змінювати смак, аромат, свіжість продуктів; погіршувати показники безпеки; скорочувати терміни зберігання; рівномірно розподілятися в продукті. Наприклад, відомо, що продукти, збагачені харчовими волокнами пшениці, сої та інших злаків, можуть знижувати абсорбцію мінералів у кишечнику завдяки тому, що такі продукти містять значну кількість фітинової та уронової кислот, які зв'язують йони кальцію, магнію, цинку та заліза у нерозчинні комплекси та перешкоджають засвоєнню цих елементів. Водночас останнім часом з'явилися публікації про позитивний вплив на засвоєння кальцію таких харчових волокон, як інουλін та олігофруктоза. Оцінюється безпечність хімічної взаємодії інгредієнтів, якими збагачується продукт, між собою та з компонентами основного продукту. Обираються такі їх форми та сполуки, які забезпечують їх максимальне збереження під час виробництва та зберігання. Відомо, наприклад, що кальцій та залізо конкурують у кишківнику за всмоктування, тому одночасне збагачення продукту кальцієм та залізом навряд чи можна вважати доцільним.

Кальцій відноситься до важко засвоюваних елементів. У складі харчових продуктів Кальцій знаходиться у вигляді погано розчинних або абсолютно нерозчинних у воді сполук. Тільки дія на них жовчних кислот, що супроводжується утворенням комплексних сполук, дозволяє перевести Кальцій в засвоюваний стан. В результаті попадання в організм людини з їжею всмоктується приблизно 10...40 % Кальцію. Всмоктування Кальцію в основному відбувається у верхньому відділі тонкого кишківника у вигляді одноосновних солей фосфорної кислоти. Слід пам'ятати, що кальцій засвоюється лише у співвідношенні з фосфором 1 : 1,5. Всмоктування Кальцію зменшується за вмісту в раціоні великої кількості жирів, фітинових кислот (злакові культури), щавлевої кислоти (щавель, шпинат).

Відомо також, що залізо перешкоджає засвоєнню багатьох інших металів: магнію, міді, марганцю, цинку тощо. Якщо одночасно з вітаміном Е до організму надходить залізо у тривалентній формі, воно окислюватиме токоферол і переводитиме його в неактивну форму. Слід брати до уваги, що двовалентне залізо не викликає окислення.

Магній та жирні кислоти утворюють милоподібні солі, які не піддаються біодеградації у кишечнику. Водночас збагачення продукту вітамінами групи В буде неефективним у разі низького вмісту в них магнію, що є кофактором утворення тіамініпрофосфату, необхідного для засвоєння тіаміну та інших вітамінів групи В.

Збагачення міддю продуктів, що містять курячі яйця, буде неефективним через утворення жовтками яєць нерозчинних комплексів з міддю. Засвоєнню міді також перешкоджає вітамін С. За всмоктування у

кишечнику з міддю конкурує цинк.

Збагачення продукту фолієвою кислотою доцільно проводити з додатковим внесенням до продукту вітаміну В<sub>12</sub>, оскільки вітаміни групи В є синергістами, і достатній рівень одного з них може досить довго маскувати нестачу іншого, що призводить до необоротних нервових розладів.

Антивітаміни – речовини, які зменшують активність вітамінів або повністю інактивують їх. Антивітаміни поділяють на дві групи:

Подібні за структурою і конкурують з вітамінами за ферментні системи, хоч не можуть виконувати функції вітамінів: дезоксипіридоксин – антивітамін піридоксину; піритіамін – тіаміну; глюкоаскорбінова кислота – аскорбінової кислоти; ніацитин – ніацину .

Речовини, які спроможні модифікувати, зв'язувати або руйнувати вітаміни, зменшуючи їх біологічну активність: авідин – антивітамін біотину; аскорбатоксидаза, аскорбіназа – аскорбінової кислоти; тіаміназа – тіаміну.

#### Література

1.Ощипок І. М., Онишко Л. Й. Збагачення харчової сировини для створення продуктів здорового харчування. *Вісник Львівського торговельно-економічного університету. Технічні науки*. 2019. Вип. 22. С. 44–51.

2 Зубар, Н.М. Основи фізіології та гігієни харчування: підручник. Київ.: Центр учбової літератури, 2010. 336 с.

ЗМІСТ

<b>СЕКЦІЯ АНАЛІТИЧНА ХІМІЯ.....</b>	<b>5</b>
Бондаренко В.В., Худякова С.М., Кондратюк Н.В. ВЛАСТИВОСТІ ФЛАВОНОЇДІВ ТА СУЧАСНІ ПРОБЛЕМИ ЇХ ВИЗНАЧЕННЯ.....	6
Корольчук Н.М., Сидорова Л. П. АНАЛІТИЧНИЙ КОНТРОЛЬ ВМІСТУ ДЕЯКИХ ІОНІВ МЕТАЛІВ У ХАРЧОВИХ ПРОДУКТАХ ТА ОБ'ЄКТАХ ДОВКІЛЛЯ.....	10
Сисенко О.В., Єгорова А.В., Скрипинець Ю.В., Чеботарська І.І., Александрова Д.І., Кашуцький С.М. ВАЛІДАЦІЯ СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧНОЇ МЕТОДИКИ ВИЗНАЧЕННЯ ТИКАГРЕЛОРУ ДЛЯ ПРОВЕДЕННЯ ПОРІВНЯЛЬНИХ ДОСЛІДЖЕНЬ СТУПЕНЯ ВИЛУЧЕННЯ ПРИ ВИВЧЕННІ ДОСТАВКИ ЛІКАРСЬКОГО ЗАСОБУ ЧЕРЕЗ НАЗОГАСТРАЛЬНИЙ ЗОНД <i>IN VITRO</i> .....	14
Смагін І.О., Худякова С.М., Кондратюк Н.В. НОВА СОРБЦІЙНО-АНАЛІТИЧНА СИСТЕМА ДЛЯ ТЕСТ-ВИЗНАЧЕННЯ ІОНІВ СРІБЛА.....	19
Тріско О.О., Сидорова Л.П. ВИЗНАЧЕННЯ МИШ'ЯКУ В ПРОДУКТАХ І ОБ'ЄКТАХ ДОВКІЛЛЯ.....	21
Андрейченко К.В., Хмельникова Л. І. НАКОПИЧЕННЯ d - МЕТАЛІВ В НАСІННІ ДЕРЕВНИХ РОСЛИН.....	24
Маторіна К.В., Жук Л.П., Токарев М.В. АНАЛІЗ КІЛЬКІСНИХ МЕТОДІВ ВИЗНАЧЕННЯ ВІТАМІНІВ ГРУПИ В.....	27
Жук Л.П., Маторіна К.В., Бовкун В.Д., Борода Ю. Є. ПЕРСПЕКТИВИ ЗАСТОСУВАННЯ АЗОРЕАГЕНТІВ ДЛЯ ВИЗНАЧЕННЯ НІТРОГЕНОВМІСНИХ СПОЛУК У ВИГЛЯДІ ІОННИХ АСОЦІАТІВ.....	31
Cherniavska A.Yu., Vishnikin A.B. THE INFUSION OF INORGANIC ANIONS INTO THE INTERACTION OF CPAA WITH ORGANIC BARBERRIES AND CHELATE COMPLEX ANIONS.....	33
<b>СЕКЦІЯ ОРГАНІЧНА ТА ФАРМАЦЕВТИЧНА ХІМІЯ .....</b>	<b>36</b>
Бершак А., Коптева С.Д., Коваленко С.І. <i>IN SILICO</i> ДОСЛІДЖЕННЯ 3-R-БЕНЗО[f][1,2,4]ТРИАЗИНО[2,3-d]-[1,4]ДІАЗЕПІН-2,7(6H,8H)-ДІОНІВ.....	37
Ліб О.С., Просяник О.В., Куцик-Савченко Н.В., Лебідь О.С., Кисельов В.В., Янова К.В., Харченко О.В. МЕХАНІЗМ ПІРАМІДАЛЬНОЇ ІНВЕРСІЇ АТОМА АЗОТУ В 1-АРИЛАЗИРИДИНАХ. АНАЛІЗ ВПЛИВУ ЗАМІСНИКІВ В АРОМАТИЧНОМУ КІЛЬЦІ ТА ВНУТРІШНЬО МОЛЕКУЛЯРНИХ ВЗАЄМОДІЙ НА ПЕРЕВАЖНІ КОНФОРМАЦІЇ ТА БАР'ЄРИ ІНВЕРСІЇ АТОМІВ АЗОТУ.....	42
Просяник О.В., Ліб О.С., Куцик-Савченко Н.В., Лебідь О.С., Кисельов В.В., Янова К.В., Харченко О.В. МОДИФІКАЦІЯ ПРАВИЛА БЕНТА ЩОДО ВПЛИВУ ВНУТРІШНЬО МОЛЕКУЛЯРНИХ ВЗАЄМОДІЙ НА БАР'ЄРИ ІНВЕРСІЇ АТОМІВ АЗОТУ.....	46
Романовська А.О., Коптева С.Д., Коваленко С.І. О-АМІНОБЕНЗОНІТРИЛ У СИНТЕЗІ 2-R-[1,2,4]-ТРИАЗОЛО[1,5-c]ХІНАЗОЛІНІВ .....	48
Синявський С.В., Коптева С. Д., Воскобойнік О. Ю. ДОСЛІДЖЕННЯ ЦИТОТОКСИЧНОЇ ДІЇ ДЕЯКИХ 2-R-БЕНЗО[e]-[1,2,4]ТРИАЗОЛО[1,5-c][1,2,3]ТРИАЗИНІВ З ВИКОРИСТАННЯМ <i>IN SILICO</i> ТА <i>IN VITRO</i> МЕТОДОЛОГІЇ.....	51
Кут Д.Ж., Кут М.М., Онисько М.Ю. ДОСЛІДЖЕННЯ РЕГІОСЕЛЕКТИВНОСТІ ЕЛЕКТРОФІЛЬНОЇ ВНУТРІШНЬОМОЛЕКУЛЯРНОЇ ГЕТЕРОЦИКЛІЗАЦІЇ 2-АЛКЕНІЛТІО-3-ЗАМІЩЕНИХ ХІНАЗОЛІН-4(3H)-ОНІВ ПІД ДІЄЮ ТЕТРАГАЛОГЕНІДІВ СЕЛЕНУ ТА ТЕЛУРУ.....	55

*XXIII Всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань сучасної хімії, Дніпро, 19-22 травня 2025 р.*

К.І. Тимошенко, В.О. Пальчиков СИНТЕЗ ФЕРОЦЕНОВМІСНИХ ТЕТРАГІДРОПІДАЗИНІВ.....58

**СЕКЦІЯ ХІМІЯ ТА ХІМІЧНА ТЕХНОЛОГІЯ ВИСОКОМОЛЕКУЛЯРНИХ СПОЛУК.....61**

A. Kucherenko, A. Boshchuk, O. Pomirko, N. Baran, V. Moravskiy OPTIMIZATION OF THE MASS CHARACTERISTICS OF A LOWER LIMB PROSTHETIC SOCKET.....62

Попадюк М.В., Поджарський М.А. СУЧАСНІ НАПРЯМИ ВДОСКОНАЛЕННЯ ТЕХНОЛОГІЇ ВИРОБНИЦТВА ПОЛІЕТИЛЕНТЕРЕФТАЛАТУ.....64

Верташ Д.С., Поджарський М.А. ОПТИМІЗАЦІЯ КАТАЛІТИЧНИХ СИСТЕМ ДЛЯ КУМОЛЬНОГО МЕТОДУ ОТРИМАННЯ ФЕНОЛУ: ПОРІВНЯЛЬНИЙ АНАЛІЗ АЛЬТЕРНАТИВ СУЛЬФАТНІЙ КИСЛОТИ.....67

Гриценко Т. О. ЕЛЕКТРОПРОВІДНІСТЬ РОЗЧИНІВ НА ОСНОВІ ВОДРОЗЧИННИХ ПОЛІМЕРІВ.....70

Онянов Є.О., Поджарський М.А. ПЕРСПЕКТИВНІ ШЛЯХИ ВДОСКОНАЛЕННЯ ВИРОБНИЦТВА ЕМУЛЬСІЙНОГО ПОЛІВІНІЛХЛОРИДУ.....74

**СЕКЦІЯ ФІЗИЧНА ТА НЕОРГАНІЧНА ХІМІЯ.....76**

Блашко Н.М., Марчук О.В. КРИСТАЛІЧНА СТРУКТУРА - Pr<sub>3</sub>Mn(Co)<sub>0.1</sub>Ga<sub>1.6</sub>S<sub>7</sub>.....77

Крячков Д.О., Уймин А.О., Груздева О.В. ОЦІНКА ЕФЕКТИВНОСТІ МЕТОДІВ ВИЛУГОВУВАННЯ Zn ТА Mn ІЗ ВІДПРАЦЬОВАНИХ ЛУЖНИХ БАТАРЕЙОК ДЛЯ ПОДАЛЬШОГО СИНТЕЗУ ХЕЛАТНИХ СПОЛУК.....82

Вальцингер К. О., Плясовська К. А., Полонський В. А., Варгалюк В. Ф. ДОСЛІДЖЕННЯ ДЕЯКИХ ЕЛЕКТРОКІНЕТИЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ СИСТЕМИ Mn<sup>2+</sup>-МАЛЕЇНОВА КИСЛОТА.....85

Савченко Є. О., Вальцингер К.О., Плясовська К. А. ДОСЛІДЖЕННЯ РОЗЧИННОСТІ ФУМАРОВОЇ КИСЛОТИ В ВОДНО-СПИРТОВИХ СУМІШАХ.....88

Токар А.В., Водолазська М.В. ДОСЛІДЖЕННЯ СОРБЕНТІВ БІОМЕДИЧНОГО ПРИЗНАЧЕННЯ ЗА ДОПОМОГОЮ ІЧ-СПЕКТРОСКОПІЇ.....92

Третяк В.С., Полонський В.А., Кушнерьов О.І. КОРОЗІЙНІ І ЕЛЕКТРОХІМІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ ВИСОКОЕНТРОПІЙНИХ СПЛАВІВ Cu<sub>5</sub>FeNiMnAlSi ТА Cu<sub>5</sub>FeNiMnAlCr.....97

**СЕКЦІЯ ХАРЧОВА ХІМІЯ ТА СУЧАСНІ ХАРЧОВІ ТЕХНОЛОГІЇ.....102**

Бондаренко В.В., Худякова С.М., Кондратюк Н.В. ВИЗНАЧЕННЯ ФЛАВОНОЇДІВ В ХАРЧОВИХ ПРОДУКТАХ.....103

Кулініч М., Чернушенко О.О. СУМІСНІСТЬ ОКРЕМИХ ФУНКЦІОНАЛЬНИХ ІНГРЕДІЄНТІВ ОЗДОРОВЧИХ ПРОДУКТІВ .....105