

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ЧЕРКАСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ БОГДАНА ХМЕЛЬНИЦЬКОГО

НАВЧАЛЬНО-НАУКОВИЙ ІНСТИТУТ
ПРИРОДНИЧИХ ТА АГРАРНИХ НАУК

КАФЕДРА ХІМІЇ ТА НАНОМАТЕРІАЛОЗНАВСТВА

**II Міжнародна наукова інтернет-конференція
«Фундаментальні підходи та
інновації в хімії»**

ЗБІРНИК МАТЕРІАЛІВ



4 червня 2026 р., м. Черкаси, Україна

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ЧЕРКАСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ БОГДАНА ХМЕЛЬНИЦЬКОГО

НАВЧАЛЬНО-НАУКОВИЙ ІНСТИТУТ
ПРИРОДНИЧИХ ТА АГРАРНИХ НАУК

КАФЕДРА ХІМІЇ ТА НАНОМАТЕРІАЛОЗНАВСТВА

**II Міжнародна наукова інтернет-конференція
«Фундаментальні підходи та
інновації в хімії»**

ЗБІРНИК МАТЕРІАЛІВ

Київ
2026

УДК: 54:001.891:004:37:502

Фундаментальні підходи та інновації в хімії : збірник матеріалів II Міжнародної наукової інтернет-конференції (м. Черкаси, 4 червня 2026 р.). Черкаси : Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького, 2026. 125 с.

Міністерство освіти і науки України, Державна наукова установа «Український інститут науково-технічної експертизи та інформації» (УкрІНТЕІ), Посвідчення № 522 від 22 квітня 2026 р. (II Міжнародна наукова інтернет-конференція «Фундаментальні підходи та інновації в хімії»).

ISBN 978-617-8324-82-7

У збірнику матеріалів II Міжнародної наукової інтернет-конференції «Фундаментальні підходи та інновації в хімії» представлено наукові праці за такими напрямками: квантово-хімічне моделювання та практичне матеріалознавство; фундаментальна, органічна, неорганічна та фізична хімія; електрохімія; аналітичні методи дослідження у вирішенні екологічних проблем; інноваційні технології викладання хімії та біології у вищій та загальноосвітній школі; екологічна хімія; аграрна наука і освіта в XXI столітті: проблеми, перспективи та інновації.

ПРОГРАМНИЙ КОМІТЕТ:

Кирилюк Є. М. – голова комітету, в. о. ректора Черкаського національного університету імені Богдана Хмельницького (ЧНУ); Спрягайло О. В. – проректор з наукової, інноваційної та міжнародної діяльності ЧНУ; Волошкевич Г. А. – в. о. першого проректора ЧНУ, кандидат юридичних наук, доцент, кандидат історичних наук, професор; Гаврилюк Г. М. – проректор з виховної роботи та іміджевої діяльності ЧНУ; Мінаєв Б. П. – професор кафедри хімії та наноматеріалознавства, д.х.н., професор; Гаврилюк М. Н. – директор Навчально-наукового інституту природничих та аграрних наук ЧНУ, к.б.н., доцент; Шафорост Ю. А. – завідувач кафедри хімії та наноматеріалознавства ЧНУ, к.х.н., доцент; Мchedlov-Петросян М. О. – член-кореспондент НАНУ, завідувач кафедри фізичної хімії ХНУ ім. В. Н. Каразіна, д.х.н., професор; Кучмій С. Я. – член-кореспондент НАНУ, завідувач відділу фотохімії Інституту фізичної хімії імені Л. В. Писаржевського НАН України, д.х.н., професор; Сахно Т. В. – професор кафедри біотехнології та хімії Полтавського державного аграрного університету, д.т.н., ст. н. с.; Стахіра П. Й. – професор кафедри електронної інженерії національного університету «Львівська політехніка», д.т.н., професор; Волинюк Д. Ю. – професор кафедри хімії полімерів і технологій Каунаського університету технологій, Каунас, Литва, д.т.н., провідний науковий співробітник; Ніч Я. – професор Інституту хімії Сілезького університету у Катовіце, Польща, д.х.н., професор; Огрен Х. – професор Інституту фізики та астрономії Упсальського університету, Швеція; Вахтрас У. – професор Вищої королівської технічної школи, м. Стокгольм, Швеція; Візір М. М. – заступник директора з контролю якості, ТОВ Ауробіндо Фарма & ТОВ Ауrolайф Фарма Юніт II, США

ОРГАНІЗАЦІЙНИЙ КОМІТЕТ:

Гаврилук М. Н. – кандидат біологічних наук, доцент, директор Навчально-наукового інституту природничих та аграрних наук Черкаського національного університету імені Богдана Хмельницького (м. Черкаси); Шафорост Ю. А. – кандидат хімічних наук, доцент, завідувач кафедри хімії та наноматеріалознавства Черкаського національного університету імені Богдана Хмельницького (м. Черкаси); Мінаєв Б. П. – доктор хімічних наук, професор кафедри хімії та наноматеріалознавства Черкаського національного університету імені Богдана Хмельницького (м. Черкаси); Погребняк О. С. – кандидат хімічних наук, доцент кафедри хімії та наноматеріалознавства Черкаського національного університету імені Богдана Хмельницького (м. Черкаси); Шевченко О. П. – кандидат хімічних наук, доцент кафедри хімії та наноматеріалознавства Черкаського національного університету імені Богдана Хмельницького (м. Черкаси); Бондарчук С. В. – кандидат хімічних наук, доцент кафедри хімії та наноматеріалознавства Черкаського національного університету імені Богдана Хмельницького (м. Черкаси); Литвин В. А. – кандидат хімічних наук, доцент кафедри хімії та наноматеріалознавства Черкаського національного університету імені Богдана Хмельницького (м. Черкаси); Смаліус В. В. – кандидат хімічних наук, доцент кафедри хімії та наноматеріалознавства Черкаського національного університету імені Богдана Хмельницького (м. Черкаси); Карауш-Кармазін Н. М. – кандидат хімічних наук, науковий співробітник Навчально-дослідного центру квантових біотехнологій і фундаментальних проблем агрокомплексу України Черкаського національного університету імені Богдана Хмельницького (м. Черкаси); Мінаєва В. О. – кандидат хімічних наук, доцент, науковий співробітник Навчально-дослідного центру квантових біотехнологій і фундаментальних проблем агрокомплексу України Черкаського національного університету імені Богдана Хмельницького (м. Черкаси).

Матеріали публікуються в авторській редакції. Редакція залишає за собою право технічного коригування текстів. За дотримання права інтелектуальної власності, норм академічної доброчесності, достовірність матеріалів та обґрунтування висновків відповідають автори та їх наукові керівники.

Схвалено вченою радою Черкаського національного університету імені Богдана Хмельницького (протокол № 12 від 18 червня 2026 р.)

УДК: 54:001.891:004:37:502

© Черкаський національний університет
ім. Б. Хмельницького, 2026
© Автори матеріалів, 2026
© Видавець Цибульська, 2026

ISBN 978-617-8324-82-7

ЗМІСТ

СЕКЦІЯ 1. КВАНТОВО-ХІМІЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ТА ПРАКТИЧНЕ МАТЕРІАЛОЗНАВСТВО

Boris Minaev, Valentyna Minaeva, Pavlo Stakhira, Oleksandr Panchenko ANALYSIS OF SOC EFFECTS IN THE NITROGEN DISCHARGE SPECTRUM AS A USEFUL EXAMPLE FOR SPIN VIBRONIC PERTURBATION TREATMENT IN OLED MATERIALS	8
Lidan Xiao, Yueying Qi, Boris F. Minaev, Hans Ågren, Bing Yan THE ROTATIONAL-VIBRATIONAL SPECTRA IN ULTRAVIOLET ABSORPTION OF S ₂	11
Serhii Bondarchuk, Chao Chen, Yilin Cao, Yiding Ma, Weipeng Lai, Tao Yu, Zhixiang Zhang, Yingzhe Liu A COMPUTATIONAL APPROACH FOR DISTINGUISHING OF LASER-IGNITABLE AND NON-IGNITABLE ENERGETIC COORDINATION COMPLEXES (LECCs)	13
Марія Терebinська, Ольга Ткачук, Оксана Філоненко, Андрій Дацюк, Віктор Лобанов DFT-ДОСЛІДЖЕННЯ ВПЛИВУ ФТОРУВАННЯ НА ВЛАСТИВОСТІ НЕФУЛЕРЕНОВИХ АКЦЕПТОРІВ ІТІС	16
Сергій Рогальський, Дмитро Каменських, Олег Джу́жа, Віталій Євдокименко ТЕПЛОСТІЙКІ КОМПОЗИТНІ ПОКРИТТЯ НА ОСНОВІ ФЕНОЛЬНОЇ СМОЛИ І СЛЮДИ	18
Борис Мінаєв, Павло Стахіра, Олександр Панченко, Валентина Мінаєва ХІРАЛЬНО-ІНДУКОВАНА СПІНОВА СЕЛЕКТИВНІСТЬ ПРИ ДИЗАЙНІ ОРГАНІЧНИХ СВІТЛО-ВИПРОМІНЮЮЧИХ ДІОДІВ З ЦИРКУЛЯРНО ПОЛЯРИЗОВАНИМ ВИПРОМІНЮВАННЯМ	21
Роман Заболотний, Сергій Бондарчук МОДЕЛЮВАННЯ ЧУТЛИВОСТІ ДО ТЕРТЯ ВИСОКОАЗОТНИХ ГЕТЕРО- ЦИКЛІВ ІЗ ВИКОРИСТАННЯМ ANN ТА GFA-ПІДХОДІВ	23
Анастасія Комкова, Сергій Бондарчук ПРОГНОЗУВАННЯ ТОКСИЧНОСТІ ОРГАНІЧНИХ РЕЧОВИН ЗА ДОПОМОГОЮ МЕТОДІВ МАШИННОГО НАВЧАННЯ	26
Діана Мусієнко, Борис Мінаєв ТЕОРЕТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ВЗАЄМОДІЇ СИНГЛЕТНОГО ТА ТРИПЛЕТ- НОГО КИСНЮ З АНТРАЦЕНОМ	29
Вероніка Панащенко, Богдана Валішкевич ГЕНЕРАТИВНИЙ ШТУЧНИЙ ІНТЕЛЕКТ У DE NOVO ДИЗАЙНІ ФЕРМЕНТІВ: СУЧАСНІ ДОСЯГНЕННЯ ТА ПЕРСПЕКТИВИ	31
Nataliya Karaush-Karmazin, Daniel Swoboda, Marek Beneš, Eliška Jiroušková, Lucie Dostálková, Radoslaw Podsiadly, Romana Sokolová, Jacek E. Nycz ELECTROCHEMICAL, SPECTROSCOPIC, AND DFT INVESTIGATION OF A PYRIDINE-MODIFIED PHENOTHIAZINIUM PHOTOSENSITIZER	33
Дмитро Старокадомський, Андрій Мельник, Ольга Радченко, Ольга Качоровська, Марія Решетник МІКРОТВЕРДІСТЬ КОМПОЗИТІВ НА ОСНОВІ ЕПОКСИДНОЇ СМОЛИ З МІКРОКВАРЦОМ	36

Alexander Savenko, Lyudmila Kopylova, Tatyana Shaposhnikova, Nina Anikina, Olga Krivushchenko, Natalia Gavrilyuk, Anatoly Zolotarenko, Alexander Zolotarenko, Yuri Zhirko, Dmitry Shchur, Maratbek Gabdullin THE PRESENCE OF MAGNESIUM ATOMS IN ALLOYS REDUCES THE ACTIVITY OF HYDROGEN ATOMS	41
Natalia Gavrilyuk, Alexander Savenko, Lyudmila Kopylova, Tatyana Shaposhnikova, Vasili Mashira, Nina Anikina, Olga Krivushchenko, Anatoly Zolotarenko, Alexander Zolotarenko, Yuri Zhirko, Dmitry Shchur, Maratbek Gabdullin EQUILIBRIUM DISTRIBUTION OF INTERSTITIAL ATOMS IN AN ORDERED ALLOY	42
Olga Krivushchenko, Alexander Savenko, Lyudmila Kopylova, Tatyana Shaposhnikova, Nina Anikina, Natalia Gavrilyuk, Taisiya Korochkova, Anatoly Zolotarenko, Alexander Zolotarenko, Yuri Zhirko, Dmitry Shchur, Maratbek Gabdullin DEVELOPMENT OF THE THEORY OF INTERSTITIAL IMPURITY SOLUBILITY ...	44
Anatoly Zolotarenko, Alexander Savenko, Lyudmila Kopylova, Tatyana Shaposhnikova, Nina Anikina, Olga Krivushchenko, Natalia Gavrilyuk, Alexander Zolotarenko, Yuri Zhirko, Dmitry Shchur, Maratbek Gabdullin DEPENDENCE OF HYDROGEN CAPACITY ON THE AMOUNT OF INITIAL COMPONENTS IN CRYSTALS	45
Alexander Zolotarenko, Anatoly Zolotarenko, Alexander Savenko, Lyudmila Kopylova, Tatyana Shaposhnikova, Nina Anikina, Olga Krivushchenko, Natalia Gavrilyuk, Yuri Zhirko, Dmitry Shchur, Maratbek Gabdullin A THEORETICAL STUDY OF ATOMIC ORDERING IN A_3B BINARY ALLOYS	47

СЕКЦІЯ 2. ФУНДАМЕНТАЛЬНА, ОРГАНІЧНА, НЕОРГАНІЧНА ТА ФІЗИЧНА ХІМІЯ

Elina Romanenko, Mykhailo Kurmach, Oleh Lytiuha, Serhii Poliakov, Pavlo Yaremov, Oleksiy Shvets CATALYTIC PROPERTIES OF HIERARCHICAL SN-CONTAINING ZEOLITES IN THE PROCESS OF PRODUCING METHYL LACTATE FROM GLUCOSE	48
Elina Romanenko, Mykhailo Kurmach, Oleksiy Shvets DETERMINATION OF THE ZERO CHARGE POINT ON THE SURFACE OF TI-, SN-, ZR-CONTAINING ZEOLITES BY THE POTENTIOMETRIC MASS TITRATION METHOD	49
Мищенко Євгеній, Курочка Альона ЕКСПЕРТНЕ ДОСЛІДЖЕННЯ ПРОПОНІЛХЛОРИДУ	50
Дмитро Шинкаренко ЕКСПЕРТНЕ ДОСЛІДЖЕННЯ ФЕНТАНІЛУ	53
Любов Дорошенко ДОСЛІДЖЕННЯ СИНТЕТИЧНОГО КАНАБІНОЇДА MDMB-BUTINACA	56
Злата Тимошук, Роман Козакевич НАНОСТРУКТУРОВАНІ КОМПОЗИТИ НА ОСНОВІ ПІРОГЕННОГО КРЕМНЕ-ЗЕМУ ЯК НОСІЇ ІБУПРОФЕНУ ТА КЕТОРОЛАКУ ТРОМЕТАМІНУ	58

Marina Dekhtyar POLYMETHINE BROWNIAN PHOTOMOTORS	60
Лариса Федина, Михайло Федина КРИСТАЛІЧНА СТРУКТУРА ТЕРНАРНИХ ГЕРМАНІДІВ КУПРУМУ ТА ДИСПРОЗІЮ	62
Валентина Плющ, Вікторія Бойко АНАЛІТИЧНИЙ ОГЛЯД МЕТОДІВ «ЗЕЛЕНОГО» СИНТЕЗУ НАНОЧАСТИНОК СРІБЛА ТА ЗОЛОТА	64
Валентина Плющ, Карина Тимкович ДОСЛІДЖЕННЯ КІНЕТИЧНИХ ХАРАКТЕРИСТИК ХІМІЧНИХ РЕАКЦІЙ МЕТОДОМ ФЕМТОСЕКУНДНОЇ СПЕКТРОСКОПІЇ: АНАЛІТИЧНИЙ ОГЛЯД	67
Сергій Шкурдола, В'ячеслав Пасічник, Іван Архіпов ОПТИМІЗАЦІЯ ЕКСТРАКЦІЇ ТА ХРОМАТОГРАФІЧНОГО ВИЗНАЧЕННЯ КАНАБІНОЇДІВ У ЖЕЛАТИНОВИХ ПАСТИЛКАХ НА ОСНОВІ ДОСВІДУ АНАЛІЗУ СКЛАДНИХ МАТРИЦЬ	71

СЕКЦІЯ 3. ЕЛЕКТРОХІМІЯ

Наталія Корчик, Надія Буденкова, Оксана Мисіна ЕЛЕКТРОХІМІЧНЕ ВИЛУЧЕННЯ МІДІ З РОЗЧИНІВ ТРАВЛЕННЯ	74
Олександр Шевченко, Олена Жабковська, Софія Мандрабура ЕЛЕКТРОХІМІЧНІ ДОСЛІДЖЕННЯ ПРОЦЕСУ ОКИСНЕННЯ ЛІЗИН ГІДРОХЛОРИДУ	75
Ольга Гічан ЗРОСТАННЯ ГУСТИНИ СТРУМУ ПРИ ДИFUЗІЙНО-КОНТРОЛЬОВАНІЙ СТАДІЇ АДСОРБЦІЇ НЕЙТРАЛЬНИХ МОЛЕКУЛ ІЗ ТОНКОГО ШАРУ НА ЕЛЕКТРОДІ З ГАРМОНІЧНОЮ ШЕРЕХАТІСТЮ ПОВЕРХНІ	78

СЕКЦІЯ 4. АНАЛІТИЧНІ МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ У ВИРІШЕННІ ЕКОЛОГІЧНИХ ПРОБЛЕМ

Mykola Vizir, Ruslan Vizir, Dmytro Vizir MACHINE-LEARNING CLASSIFICATION OF PHARMACEUTICAL QUALITY- CONTROL EVENTS: THE LIMITS OF COMPOUND DATA INTERVENTIONS	80
Діана Загребельна МОНІТОРИНГ ВМІСТУ НІТРАТІВ У ХАРЧОВИХ ПРОДУКТАХ АНАЛІТИЧ- НИМИ МЕТОДАМИ	81
Валентина Литвин, Маркета Пробін СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧНЕ ДОСЛІДЖЕННЯ ГІДРОЗОЛІВ СРІБЛА НА ОСНОВІ ЕКСТРАКТІВ З ОПЛОДНЯ ГОРІХА ВОЛОСЬКОГО	84
Антон Беляєв, Владислав Тарадайка, Юлія Шафорост, В'ячеслав Пасічник ІДЕНТИФІКАЦІЯ БАРВНИКА E110 «ЖОВТИЙ СОНЯЧНИЙ ЗАХІД» У БЕЗАЛКОГОЛЬНОМУ НАПОЇ МЕТОДОМ ТОНКОШАРОВОЇ ХРОМАТОГРАФІЇ ..	87
Олександр Корженівський, Ігор Левандовський КІНЕТИЧНА СТАБІЛЬНІСТЬ КОМПЛЕКСООУТВОРЕННЯ d-МЕТАЛІВ ІЗ ЦИК- ЛІЧНИМИ ЛІГАНДАМИ, ІММОБІЛІЗОВАНИМИ НА ПОВЕРХНІ СИЛКАГЕЛЮ ..	89

Юлія Шафорост, Олена Новікова ВИЗНАЧЕННЯ ХАРЧОВОГО БАРВНИКА E110 У ГАЗОВАНОМУ НАПОЇ «MIRINDA ORANGE» СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧНИМ МЕТОДОМ	90
Євгеній Зубко, Олег Погребняк КОЛЬОРОМЕТРИЧНЕ ВИЗНАЧЕННЯ БАРВНИКА ПОНСО 4R В БЕЗАЛКО- ГОЛЬНИХ НАПОЯХ	92

СЕКЦІЯ 5. ІННОВАЦІЙНІ ТЕХНОЛОГІЇ ВИКЛАДАННЯ ХІМІЇ ТА БІОЛОГІЇ У ВИЩІЙ ТА ЗАГАЛЬНООСВІТНІЙ ШКОЛІ

Людмила Люльченко ВИКОРИСТАННЯ ШТУЧНОГО ІНТЕЛЕКТУ У ВИКЛАДАННІ ХІМІЇ: МОЖЛИВОСТІ ТА ПЕРСПЕКТИВИ	94
Оксана Мисіна, Надія Буденкова ТЕСТУВАННЯ ЯК ФОРМА КОНТРОЛЮ ТА ОЦІНЮВАННЯ ЗНАЬ ЗДОБУВАЧІВ ВИЩОЇ ОСВІТИ У ПРОЦЕСІ ВИКЛАДАННЯ ХІМІЧНИХ ДИСЦИПЛІН	97
Тетяна Озеран, Валентина Литвин ІНТЕГРАЦІЯ ХІМІЇ З БІОЛОГІЄЮ ТА ЕКОЛОГІЄЮ В СТАРШІЙ ШКОЛІ	98
Ігор Швець ТЕХНОЛОГІЯ МІКРОНАВЧАННЯ ЯК ІНСТРУМЕНТ РЕАЛІЗАЦІЇ ЗМІШАНОГО НАВЧАННЯ ХІМІЇ	99
Юлія Шафорост, Дар'я Баранова ПРАКТИКО-ОРІЄНТОВАНЕ НАВЧАННЯ ОРГАНІЧНОЇ ХІМІЇ ЗАСОБАМИ ВИГОТОВЛЕННЯ КОСМЕТИЧНИХ ПРОДУКТІВ	101
Валентина Литвин, Анастасія Войко ДИФЕРЕНЦІАЦІЯ НАВЧАННЯ ХІМІЇ ЯК ЗАСІБ ПІДТРИМКИ УЧНІВ З РІЗНИМ РІВНЕМ ПІДГОТОВКИ	104

СЕКЦІЯ 6. ЕКОЛОГІЧНА ХІМІЯ

Юлія Шафорост, Антон Беляєв, Владислав Тарадайка ТЕРМОГРАВІМЕТРИЧНЕ ДОСЛІДЖЕННЯ ШЛАМОВИХ ВІДХОДІВ ВИРОБ- НИЦТВА ВІСКОЗНОГО ВОЛОКНА	106
Галина Петрушина, Наталія Максимова ВПЛИВ ЗЛИВОВИХ СТОКІВ НА ЗАБРУДНЕННЯ РІЧКОВИХ ВОД ПОВЕРХНЕВО-АКТИВНИМИ РЕЧОВИНАМИ	108
Софія Коваленко, Ольга Тимошук РЕЦИКЛІНГ ОРГАНІЧНИХ ВІДХОДІВ ДОМОГОСПОДАРСТВ У БІОРОЗКЛАДНІ МАТЕРІАЛИ ЯК СТРАТЕГІЯ МІНІМІЗАЦІЇ ПЛАСТИКОВОГО ЗАБРУДНЕННЯ	109
Людмила Ящук ПЕРСПЕКТИВА ВИКОРИСТАННЯ МОДИФІКОВАНИХ ПРИРОДНИХ СОРБЕН- ТІВ ДЛЯ ВИЛУЧЕННЯ БІОГЕННИХ КОМПОНЕНТІВ ІЗ СТІЧНИХ ВОД	111
Соф'я Мукомела, Олег Погребняк МОНІТОРИНГ ВМІСТУ КОФЕЇНУ В РІЗНИХ ВИДАХ ЧАЮ МЕТОДОМ УФ- СПЕКТРОФОТОМЕТРІЇ	113

Юлія Литвин, Олег Погребняк СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧНЕ ВИЗНАЧЕННЯ ЙОДАТІВ В ЙОДОВАНИЙ СОЛІ 2-БРОМО-N,N-ДИМЕТИЛАЛАНІНОМ	115
--	-----

СЕКЦІЯ 7. АГРАРНА НАУКА І ОСВІТА В ХХІ СТОЛІТТІ: ПРОБЛЕМИ, ПЕРСПЕКТИВИ ТА ІННОВАЦІЇ

Галина Петрушина, Сергій Крамарьов СИНТЕЗ ЦИНК ГЛІЦИНАТУ ДЛЯ ІНКРУСТАЦІЇ КУКУРУДЗИ	117
Юлія Шафорост, Олег Погребняк, Олександр Шевченко ОЦІНКА ВМІСТУ ВАЖКИХ МЕТАЛІВ У ҐРУНТАХ ТЕРИТОРІЙ ВІЙСЬКОВИХ НАВЧАНЬ ЧЕРКАСЬКОЇ ОБЛАСТІ	118
Вероніка Шкута, Юлія Шафорост БІОІНДИКАЦІЙНА ОЦІНКА ФІТОТОКСИЧНОСТІ ҐРУНТІВ ТЕРИТОРІЙ ВІЙСЬКОВИХ НАВЧАНЬ ЧЕРКАСЬКОЇ ОБЛАСТІ	120
Жанна Новак, Євгеній Зубко ТЕОРЕТИЧНЕ ОБҐРУНТУВАННЯ АДАПТИВНОГО ПОТЕНЦІАЛУ ТА ПРОДУК- ТИВНИХ ХАРАКТЕРИСТИК ЯЧМЕНЮ ЯРОГО В УМОВАХ ЦЕНТРАЛЬНОГО ЛІСОСТЕПУ	122
АВТОРСЬКИЙ ПОКАЖЧИК	124

СЕКЦІЯ 1. КВАНТОВО-ХІМІЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ТА ПРАКТИЧНЕ МАТЕРІАЛОЗНАВСТВО

ANALYSIS OF SOC EFFECTS IN THE NITROGEN DISCHARGE SPECTRUM AS A USEFUL EXAMPLE FOR SPIN VIBRONIC PERTURBATION TREATMENT IN OLED MATERIALS

^aBoris Minaev, ^aValentyna Minaeva, ^bPavlo Stakhira, ^aOleksandr Panchenko

^a Department of Chemistry and nanomaterials science, Bogdan Khmelnytsky National University, Cherkasy, Ukraine

^bDepartment of Electronic Engineering, Institute of Telecommunications, Radioelectronics and Electronic Engineering, Lviv Polytechnic National University, Lviv, Ukraine
e-mail: bfmin43@ukr.net

OLED technique often requires intersystem crossing measurements and spin-orbit coupling (SOC) study between singlet (S) and triplet (T) states. The N₂ molecule provides a good example of numerous S-T transitions since it possesses the most stable singlet ground state (S₀) among diatomics and a rich manifold of photostable T states. Being abundant component of air, N₂ plays a crucial role in many photochemical processes in the upper atmosphere demonstrating bright and expressive S-T perturbations [1–5].

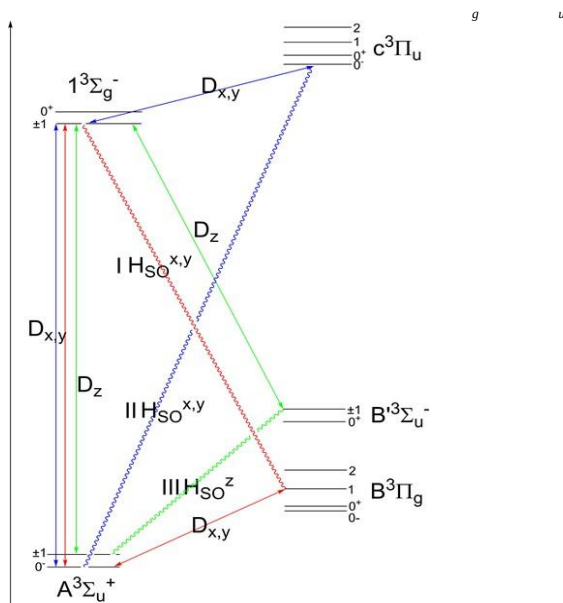


Fig. 1. Enhanced intensity borrowing for the forbidden transition $1^3\Sigma^- \rightarrow A^3\Sigma^+$. The first (I Hso) and second mechanisms (II Hso) of SOC account provide perpendicular polarization of ED transitions (D_{x,y}), and the third one is responsible for parallel polarization (D_z) along the N–N axis. We see that T-T transition can be induced by SOC (Never has been accounted for OLED)

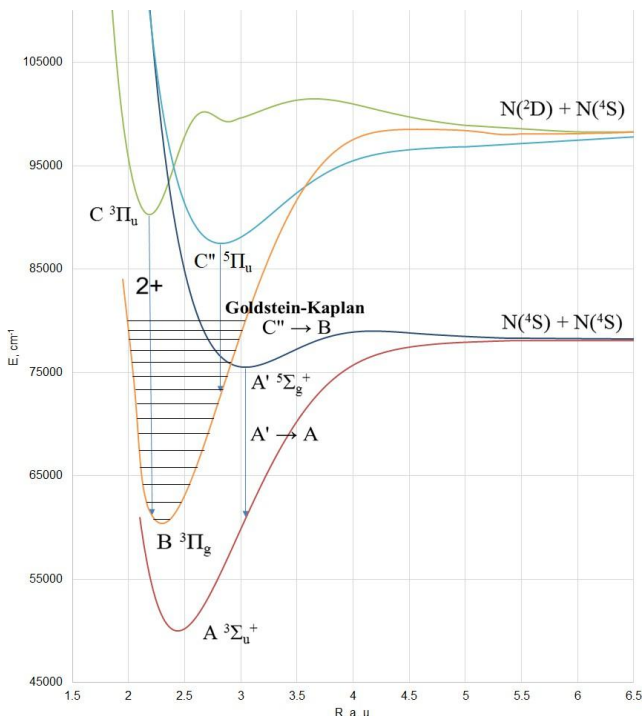


Fig. 2. PECs of several excited states of the N_2 molecule, calculated by MRCI/aug-cc-pV5Z approach. Vibrational levels for the $B^3\Pi_g$ state are shown to present the second positive $C \rightarrow B$ system and new assignment of the $C'' \rightarrow B$ emission as the Goldstein-Kaplan band

The triplet excited states manifold of N_2 is well studied in the far-UV $S_0 \rightarrow T_n$ absorption and in numerous T_1 - T_n transitions involved in Aurora Borealis and Rayleigh afterglow [1]. The discovery of new spin-forbidden transitions of N_2 induced by SOC perturbations is an important part of optical tracking of nitrogen at different altitudes [4]. The origin of intensitie borrowing of the known N_2 emission bands forbidden by the electric dipole (ED) selection rule provides a high standard of spin selection.

Fig. 1 illustrates a strict selection between spin sublevels of the triplet states. The solid lines denote ED transitions, waved lines denote SOC-induced mixing between spin sublevels. The SOC calculations are getting popular now in OLED theory often in connection with structural analysis of dye luminophores. Meanwhile, the spin sublevels selectivity of SOC perturbation is often neglected together with light-emitted polarization and color chromaticity of OLED device.

The correct assignment of the quintet-quintet transition $C''^5\Pi_u \rightarrow A'^5\Sigma_g^+$ to the Herman IR band system of N_2 (Fig. 2) was a great achievement, which put an end to a long fifty-years history of contradictory hypotheses [5]. Now it paves the way for new discoveries of the quintet (Q) states involvements into N_2 spectroscopy [2–5]. It has long been suggested that the triplet states of N_2 undergo predissociation, being perturbed by quintet analogues of the same parity [2–6]. Fig. 2 shows a number of such Q–T PEC crossings. The $A'^5\Sigma_g^+$ quintet state crosses the $B^3\Pi_g$ triplet, which is

manifested by the high $v'-v''$ lines broadening of the second positive $C \rightarrow B$ system (Fig. 2). The Herman IR transition is not shown by arrow in Fig. 2 (there is no space); instead, the new predicted $C''^5\Pi_u \rightarrow B^3\Pi_g$ band is denoted close to the Herman IR region [2]. Now we assign this Q-T transition to the well-known Goldstein-Kaplan band in the range 508–286 nm [2–6], which was assigned tentatively to the $C' \rightarrow B$ emission. It is a relatively weak rotational-vibronic system consisting of a number of complex red-degraded bands. Kaplan identified them as probably belonging to a transition from an unknown state to the $B^3\Pi_g$ state [7]. Our assignment of this complicated weak system corresponds to the calculated intensity of the Q-T transition ($C''-B$ band). At least the green-blue part of the Goldstein-Kaplan band system may be identified as the calculated spin-forbidden $C''-B$ band strongly enhanced by SOC perturbation and efficient intensity borrowing from the $B^3\Pi_g \rightarrow A^3\Sigma^+$ transition of the First Positive System [2].

Thus, the detailed analysis of spin-selected SOC effects with exact assignment of spin sublevel according to the total angular momentum quantum number $J=L+S$ in the symmetric diatomic N_2 molecule affords to make new discoveries of the spin-forbidden Q-T and S-T transitions [1–4]. This experience indicates how to apply the similar great amount of information extracted from the SOC-induced optical transitions in electroluminescent devices accounting for the radiative lifetime, polarization and quantum yield of S-T transitions in the new OLED engineering depending on spin-sublevels selection. Our review of intersystem crossing in nitrogen afterglow published in a special issue devoted to the triplet states harvesting in molecular electronics [5] is now augmented by new discoveries in the N_2 spectroscopy [2–4]. Diatomic molecules with high spectral resolution of their rovibronic spin-forbidden transitions and modern MRCI methods conjugated with DUO program represent useful experience for the OLED community being so far not in a large demand by electroluminescence.

The research presented in these conference abstracts was funded by the National Science Foundation (NSF) (Grant No 0124U003833).

References

1. B. Minaev, P. Norman, D. Jonsson, H. Ågren. Response theory calculations of singlet-triplet transitions in molecular nitrogen. *Chemical Physics*, 1995, Vol. 190, № 1, P. 11–29.
2. B. F. Minaev, R. S. da Silva, O. O. Panchenko, H. Ågren. Prediction of a new spin-forbidden transition in the N_2 molecule - $C''^5\Pi_u \rightarrow B^3\Pi_g$. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 2023, P. 108701.
3. Б. Мінаєв, О. Панченко, Х. Майді. Prediction of New Emission Band in the Spectrum of Nitrogen Molecule. *Наука і техніка сьогодні*, 2022, № 4(4), С. 321–338.
4. B. Minaev, R. S. Da Silva, O. Panchenko, H. Ågren. Prediction of new spin-forbidden transitions in the N_2 molecule—the electric dipole $A'^5\Sigma_g^+ \rightarrow A^3\Sigma_u^+$ and magnetic dipole $a'^1\Sigma_u^- \leftarrow A^3\Sigma_u^+$ transitions. *The Journal of Chemical Physics*, 2023, 158 (8) 084304.
5. B. F. Minaev, O. O. Panchenko, V. A. Minaeva, H. Ågren. Triplet state harvesting and search for forbidden transition intensity in the nitrogen molecule. *Frontiers in Chemistry*, 2022, Vol. 10, 1005684.
6. K. P. Huber, M. Vervloet. High-resolution Fourier transforms spectroscopy of supersonic jets. The $C''^5\Pi_u \rightarrow A'^5\Sigma_g^+$ Herman infrared bands of $^{14}N_2$. *J. Mol. Spectrosc.* 1992, Vol. 153, P. 17–25. DOI: 10.1016/0022-2852(92)90453-U.
7. J. Kaplan. New bands in nitrogen. *Phys. Rev.* 1934, Vol. 46, P. 534.
8. L. Xiao, S. An, B. F. Minaev, H. Ågren, B. Yan. The vibronic spectra in UV absorption of S_2 . *Astronomy & Astrophysics*, 2025, 702, A98.

THE ROTATIONAL-VIBRATIONAL SPECTRA IN ULTRAVIOLET ABSORPTION OF S₂

^aLidan Xiao, ^aYueying Qi, ^bBoris F. Minaev, ^cHans Ågren, ^dBing Yan

^aSchool of Mechanical Engineering, Jiaying University, Jiaying 314001, China

^bDepartment of Chemistry and nanomaterialsscience, Bogdan Khmelnytsky National University, Cherkasy, Ukraine

^cDepartment of Physics and Astronomy, Uppsala University, Uppsala, Sweden

^dInstitute of Atomic and Molecular Physics, Jilin University, Changchun 130012, China
e-mail: xiaold25@zjxu.edu.cn

With the initial inspiration of wanting to understand S₂ in celestial environments^[1, 2], we conducted extensive calculations of spectrum including six electronic states ($X^3\Sigma_g^-, B^3\Pi_u, B^3\Sigma_u^-, b^1\Sigma_g^+, a^1\Delta_g, f^1\Delta_u$) using the DUO program with the aim to facilitate a comprehensive spectral analysis(in **Figure 1**)^[3, 4]. The calculations incorporate potential energy curves (PECs), electric dipole transition moment (EDTMs), orbital electronic angular momentum coupling (EAMC) and spin-orbit coupling (SOC) matrix elements, all determined using a high-level ab initio method and the re-fined energy method.

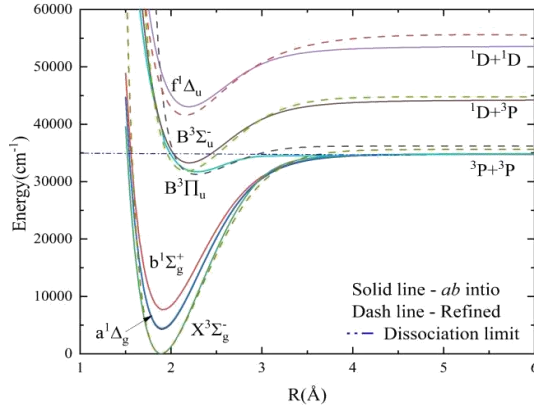


Fig. 1: Potential energy curves of $\Lambda - S$ states for the S₂ molecule

In **Figure 2**, it predicts three transition systems ($f^1\Delta_u \leftarrow a^1\Delta_g$ and $B^3\Pi_u, B^3\Sigma_u^- \leftarrow X^3\Sigma_g^-$) in the ultraviolet region. Partition functions were calculated and show good agreement with results both from Sauval & Tatum (2 states)^[5] and Frances & Robert (3 states)^[6] below approximately 1200 K. The absorption spectra at different temperatures are shown. In **Figure 3**, experimental and theoretical S₂ absorption cross-sections for the $B^3\Pi_u, B^3\Sigma_u^- \leftarrow X^3\Sigma_g^-$ transitions at 370 and 823 K are compared. A good agreement is observed with the simulated cross-section from this work.

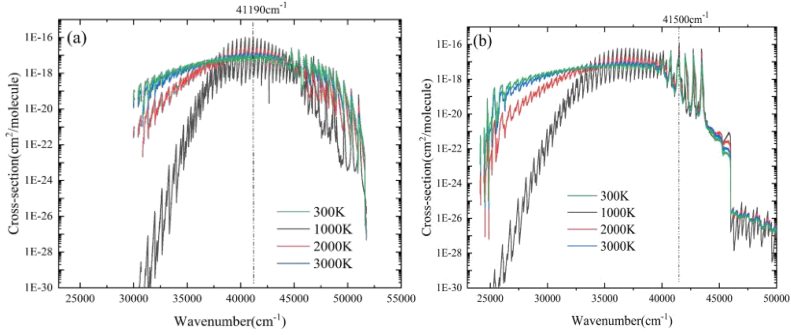


Fig. 2: Absorption cross-sections of (a) $f^1\Delta_u \leftarrow a^1\Delta_g$ and (b) $B^3\Pi_u, B^3\Sigma_u^- \leftarrow X^3\Sigma_g^-$ for S_2 are simulated by using the refined model with the coupling effect method. Temperatures of ~ 300 , 1000, 2000 and 3000 K and Gaussian profiles $\text{HWHM} = 0.1 \text{ cm}^{-1}$ are used

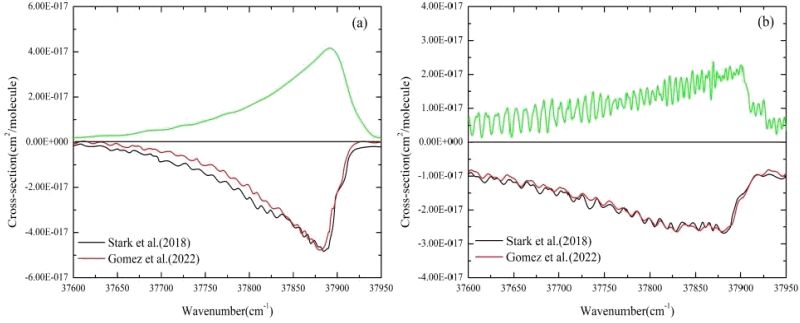


Fig. 3: Experimental (below) and theoretical (above) absorption cross-sections for two rovibronic S_2 transitions $B^3\Sigma_u^- \leftarrow X^3\Sigma_g^-(5, 0)$ band at different temperatures: at (a) 370 and (b) 823 K are obtained. Gaussian profiles $\text{HWHM} = 1 \text{ cm}^{-1}$ are used

In addition, the absorption cross-sections of the $f^1\Delta_u \leftarrow a^1\Delta_g$ system for S_2 are simulated at temperatures of ~ 300 , 1000, 2000 and 3000 K and with Gaussian profiles having a half-width at half maximum (HWHM) of 0.1 cm^{-1} . The experimental Laser-Induced Fluorescence (LIF) spectrum of the $B^3\Sigma_u^- \leftarrow X^3\Sigma_g^-(5, 0)$ band at a rotational temperature of approximately 300 K is well reproduced^[4, 7]. Along the way, we have expanded the regions of (6, 3) and (10, 0) bands for $B^3\Pi_u \leftarrow X^3\Sigma_g^-$ system, critically identifying the intensities and regions of these bands for better comparison with astronomical spectral images. To facilitate modeling of S_2 in astrophysical environments, an extensive spectrum is provided^[8], incorporating several important electronic states. Furthermore, the S_2 molecule possesses specific spectral characteristics that can be detected by astronomical observation tools, providing valuable information for studies of interstellar media and astrochemistry.

References

1. B. F. Minaev. Effect of spin-orbit coupling on the intensity of magnetic dipole transitions in molecular oxygen. *Russian Physics Journal*, 1978, Vol. 21, P. 1205–1209.
2. B. F. Minaev, O. Vahtras, H. Ågren. Magnetic phosphorescence of molecular oxygen. A study of the $b^1\Sigma_g^+ - X^3\Sigma_g^-$ transition probability using multiconfiguration response theory. *Chemical Physics*, 1996, Vol. 208, P. 299–311.
3. M. E. Green, C. M. Western. Upper vibrational states of the $B''^3\Pi_u$ state of $^{32}\text{S}_2$. *Journal of the Chemical Society Faraday Transactions*, 1997, Vol. 93, no. 3, P. 365–372.
4. F. Gomez, R. Hargreaves, I. E. Gordon. A HITRAN-formatted UV line list of S_2 -containing transitions involving electronic states. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 2024, Vol. 528, P. 3823–3832.
5. A. J. Sauval, J. B. Tatum. *Astrophysical Journal Supplement Series*, 1984, Vol. 56, P. 193–197.
6. A. Franc-Monerris, A. J. Carmona-Garc, T. Trabelsi, et al. Photochemical and thermochemical pathways to S_2 and polysulfur formation in the atmosphere of Venus. *Nature Communications*, 2022, Vol. 13, no. 1, P. 4425.
7. G. Stark, H. Herde, J. R. Lyons, et al. Fourier-transform-spectroscopic photoabsorption cross sections and oscillator strengths for the S_2 $B^3\Sigma_u^- - X^3\Sigma_g^-$ system. *Journal of Chemical Physics*, 2018, Vol. 148, no. 24, P. 244302.
8. L. Xiao, S. An, B.F. Minaev, H. Ågren, B. Yan. The rovibronic spectra in UV absorption of S_2 . *Astronomy & Astrophysics*, 2025, Vol. 702, P. A98.

A COMPUTATIONAL APPROACH FOR DISTINGUISHING OF LASER-IGNITABLE AND NON-IGNITABLE ENERGETIC COORDINATION COMPLEXES (LECCs)

^aS. V. Bondarchuk, ^bC. Chen, ^bY. Cao, ^bY. Ma, ^bW. Lai, ^bT. Yu, ^bZ. Zhang, ^bY. Liu

^aDepartment of Chemistry and Nanomaterials Science, The Bohdan Khmelnytsky National University of Cherkasy, blvd. Shevchenko, 81, Cherkasy, 18031 Ukraine.

^bXi'an Modern Chemistry Research Institute, Xi'an 710065, P. R. China.

e-mail: bondchem@cdu.edu.ua

In recent years, laser-ignitable energetic coordination complexes (LECCs) have attracted increasing attention, to the extent that a 2022 review questioned whether they represent merely a scientific curiosity or the future of energetic materials [1]. Today, LECCs constitute a rapidly expanding class of compounds, actively explored as lead-free primary explosives and laser-initiated energetic systems, with more than one hundred representatives already reported in the literature [2]. Despite this progress, a simple and universal descriptor capable of unambiguously classifying compounds as laser-ignitable or non-ignitable is still lacking. In this context, it is important to reconsider the fundamental criteria defining LECCs from a structural standpoint. First, the presence of a metal center is not a necessary condition, as purely organic compounds such as 4,4',5,5'-tetranitro-2,2'-biimidazole (TNBI) have been shown to undergo laser initiation at 1064 nm [3]. Second, specific electronic features of the metal ion, such as open-shell configuration or affiliation to *d*-elements, are not required, since TNBI forms laser-sensitive salts with main-group cations (Na^+ , K^+ , Mg^{2+} , Ca^{2+} , Ba^{2+}), which are closed-shell, chemically hard species [3]. Third, the presence of components with positive energy content is also not

obligatory; for example, LECCs incorporating biuret ligands, characterized by a strongly negative enthalpy of formation and energy content (E_c), still exhibit laser ignitability [4]. In this context, a promising descriptor is the presence of non-zero (but not too high to prevent photochemical processes) absorption at the laser irradiation wavelength, usually diode (915 nm) or Nd:YAG (1064 nm). Thus, a relatively fast, cheap and accurate method for electronic spectrum prediction for solid forms of LECCs is of paramount importance in the field.

In this work, we studied the electronic spectra of four LECCs, namely $[(\text{NH}_2\text{TzDMP})_3\text{Fe}][\text{ClO}_4]_2$ (**11**), $[(\text{NH}_2\text{TzPyr})_3\text{Fe}][\text{ClO}_4]_2$ (**12**), $[(\text{TriTzDMP})_3\text{Fe}][\text{ClO}_4]_2$ (**13**), and $[(\text{NH}_2\text{TriTzDMP})_3\text{Fe}][\text{ClO}_4]_2$ (**15**) [5]. Experimental and predicted spectra (DFT, vacuum-isolated species) are presented in Fig. 1 (bottom) as black and red curves, respectively [5]. As can be seen, this computational approach completely fails to predict the low-energy band and shows no absorption beyond 550–600 nm. This is a known limitation of spectrum prediction for vacuum-isolated species as simplified models of crystalline systems, as weak but crucial intermolecular interactions are not taken into account. Therefore, we aimed to develop a fast, cost-effective, and accurate approach for predicting the electronic spectra of solid LECCs based on the molecular structures of their constituents; the overall workflow is schematically shown in Fig. 1 (top). The numerical values of λ_{max} are listed in Table 1. We demonstrate that the exact crystal structure with the correct Z' and space group (λ_{max}) and a simplified model cell with $P1$ symmetry and $Z' = 1$ ($\lambda_{\text{max}(P1)}$) exhibit very similar spectral behavior; thus, the latter can serve as a significantly simplified yet reliable model of real LECCs.

The final approach for electronic spectrum prediction is based on plane-wave DFT calculations using the PBE functional with D2 dispersion correction, a 1000 eV energy cutoff, and a k -point grid density of $0.08 \times 2\pi/\text{\AA}$. The well-known systematic underestimation of excitation energies by the PBE functional was corrected using an empirical function (Eq. (1)):

$$\lambda_{\text{corr}} = 2.99\lambda^{0.833} \quad (1)$$

Table 1.

*Values of λ_{max} for the experimental spectra of LECCs **11**, **12**, **13**, and **15**, along with calculated (uncorrected) values for both experimental and predicted crystal structures ($\lambda_{\text{max}(P1)}$), as well as corrected values and the corresponding absolute deviations*

No	LECC	$\lambda_{\text{max}}(\text{exper})$, nm	$\lambda_{\text{max}}(\text{calc})$, nm	$\lambda_{\text{max}(P1)}(\text{calc})$, nm	$\lambda_{\text{max}}(\text{corr})$, nm	Δ , nm
11	$[(\text{NH}_2\text{TzDMP})_3\text{Fe}][\text{ClO}_4]_2$	654	778	797	657	3
12	$[(\text{NH}_2\text{TzPyr})_3\text{Fe}][\text{ClO}_4]_2$	647	796	772	644	-3
13	$[(\text{TriTzDMP})_3\text{Fe}][\text{ClO}_4]_2$	718	887	876	719	1
15	$[(\text{NH}_2\text{TriTzDMP})_3\text{Fe}][\text{ClO}_4]_2$	788	1037	1084	864	76

where λ and λ_{corr} are the uncorrected and corrected wavelengths, respectively. This transformation compresses the long-wavelength region more strongly than the short-wavelength region, thereby reproducing experimentally observed band positions more accurately across the full spectral range.

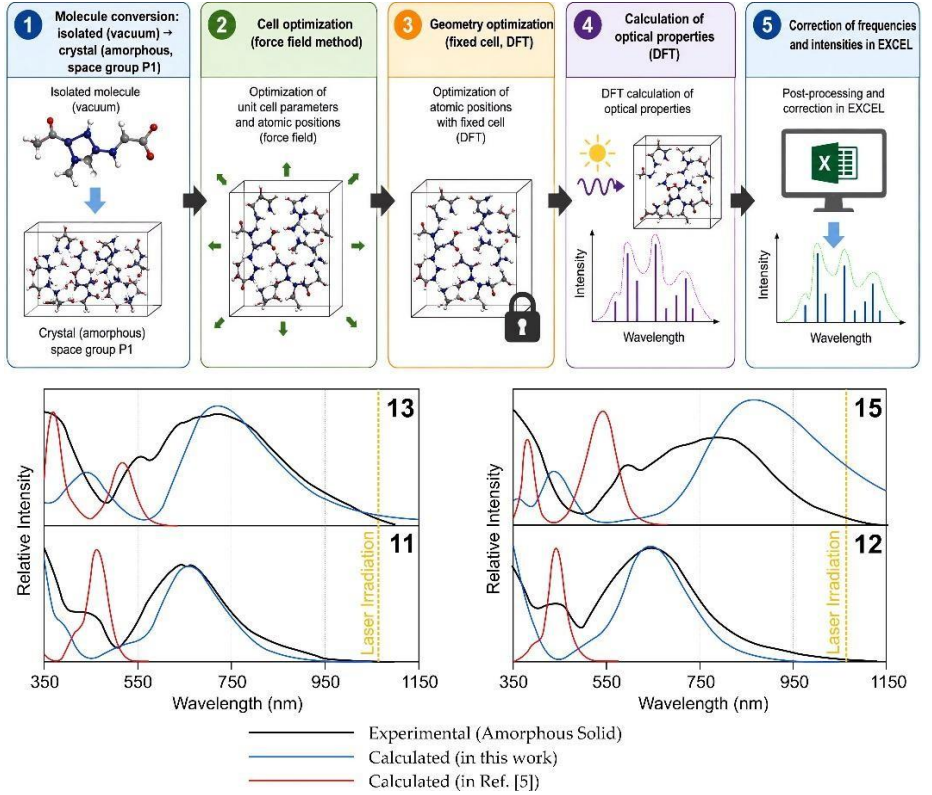


Fig. 1. Main workflow for electronic spectrum prediction from the molecular constituents of LECCs (top); comparison of experimental and predicted absorption spectra (bottom).

In addition to wavelength deviations, calculated spectra exhibited systematically underestimated absorption intensities in the low-frequency region corresponding to experimentally observed near-infrared absorption tails. To address this discrepancy, an empirical intensity scaling function dependent on wavelength was introduced (Eq. (2)):

$$I_{corr} = I \left(\frac{\lambda_{corr}}{350} \right)^{1.56} \quad (2)$$

where I and I_{corr} are the uncorrected and absorption intensities, respectively, 350 nm stands for the reference wavelength, 1.56 is the empirically determined exponent. This function increases absorption intensity progressively toward longer wavelengths while preserving relative intensity relationships in the higher-frequency region.

The absorption spectra obtained using this approach are shown in Fig. 1 (blue curves). As follows from both Fig. 1 and Table 1, the accuracy of λ_{max} prediction is satisfactory in three out of four cases, with the exception of LECC 15, for which a larger deviation ($\Delta = 76$ nm) is

observed. This discrepancy can be attributed to the insufficient calibration of the empirical correction functions (Eqs. 1 and 2), which will be refined in future work. The proposed computational workflow is specifically designed to balance speed, cost, and accuracy by omitting computationally demanding steps such as crystal structure prediction, full cell relaxation, and extensive geometry optimization wherever possible. As a result, the absorption spectrum of a given LECC can be obtained within a few hours using a standard personal computer. Although this approach is not yet suitable for high-throughput screening, a significant portion of the total time is associated with manual preprocessing steps, including structure preparation and input generation. Therefore, parallelization of calculations can substantially reduce the average time per compound to the order of tens of minutes.

Despite its relatively higher computational cost compared to simple descriptor-based methods, the proposed approach currently represents one of the most reliable criteria for distinguishing between laser-ignitable and non-ignitable energetic materials. The development of faster screening tools, such as machine learning models, is presently limited by the scarcity of experimentally validated data, as this research field remains in its early stages. Nevertheless, the described method provides a physically grounded and reasonably accurate estimation of laser ignitability and can be effectively applied in the design and evaluation of new LECCs with improved ignition and sensitivity characteristics.

References

1. K. Pawlus, T. Jarosz, A. Stolarczyk. Coordination Energetic Materials—Scientific Curiosity or Future of Energetic Material Applications? *Appl. Sci.* **2022**, *12*, 10498.
2. J. Wang, Q. Zhang, H. Wang, N. Sun, K. Wang. Research Progress of Energetic Coordination Complexes with Laser Ignition Performance. *Energ. Mater. Front.*, **2025**, *6*, 529–547.
3. Y. Wang, S. Xu, H. Li, H. Ma, Y. Zhang, Z. Guo. Laser Ignition of Energetic Complexes: Impact of Metal Ion on Laser Initiation Ability. *New J. Chem.* **2021**, *45*, 12705–12710.
4. L. Zhang, T. Wang, W. Dong, C. Zhang, Z. Lu, Z. Zhou, J. Zhang. Tailoring Transition Metals and Biuret into Laser-Ignitable Energetic Coordination Polymers with Improved Oxygen Balance and Multidentate Coordination Structures. *Cryst. Growth Des.* **2023**, *23*, 1959–1971.
5. T. W. Myers, J. A. Bjorgaard, K. E. Brown, D. E. Chavez, S. K. Hanson, R. J. Scharff, S. Tretiak, J. M. Veauthier. Energetic Chromophores: Low-Energy Laser Initiation in Explosive Fe(II) Tetrazine Complexes. *J. Am. Chem. Soc.* **2016**, *138*, 4685–4692.

DFT-ДОСЛІДЖЕННЯ ВПЛИВУ ФТОРУВАННЯ НА ВЛАСТИВОСТІ НЕФУЛЕРЕНОВИХ АКЦЕПТОРІВ ІТІС

Марія Терєбінська, Ольга Ткачук, Оксана Філоненко,
Андрій Дацюк, Віктор Лобанов

*Інститут хімії поверхні ім. О. О. Чуйка НАН України,
м. Київ, вул. Олега Мудрака 17, e-mail: terebinska@ukr.net*

Нефулеренові акцептори (NFA) останніми роками стали одними з найбільш перспективних матеріалів для органічної фотовольтаїки завдяки високим коефіцієнтам поглинання світла, можливості тонкого налаштування електронної структури та високим значенням ефективності перетворення сонячної енергії. Особливий інтерес викликають акцептори сімейства ІТІС, які поєднують широке поглинання у видимій та ближній інфрачервоній областях спектра, високу рухливість носіїв заряду та сприятливі енергетичні характеристики.

Одним із найбільш поширених підходів до модифікації нефулеренових акцепторів є введення атомів фтору до кінцевих електроноакцепторних фрагментів молекули. Відомо, що фторування може змінювати положення фронтірних молекулярних орбіталей, ширину забороненої зони та характеристики міжмолекулярної взаємодії. У результаті покращуються фотоелектричні параметри органічних сонячних елементів, зокрема напруга холостого ходу, густина фотоструму та фактор заповнення. Незважаючи на значну кількість експериментальних досліджень, механізми впливу ступеня фторування на електронну та геометричну структуру молекул залишаються предметом активного вивчення.

Метою даної роботи є дослідження впливу послідовного фторування на електронну структуру та геометричні характеристики нефулеренових акцепторів ITIC методом квантово-хімічного моделювання.

Об'єктами дослідження були молекули ITIC, ITIC-2F та ITIC-4F (рис.), які відрізняються кількістю атомів фтору у кінцевих акцепторних групах. Геометрична оптимізація виконувалась методом теорії функціоналу густини (DFT) із використанням функціоналу B3LYP та базисного набору 6-31G(d,p) у програмному пакеті GAMESS. Для оптимізованих структур проводився аналіз фронтірних молекулярних орбіталей, енергетичних характеристик та просторової будови молекул. Додатково планується виконання TD-DFT розрахунків для оцінки впливу фторування на електронні спектри поглинання.

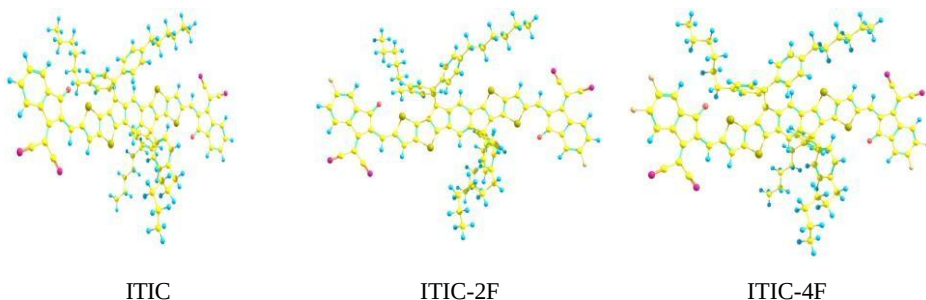


Рис. Оптимізовані структури ITIC, ITIC-2F та ITIC-4F

Згідно отриманих даних, збільшення кількості атомів фтору в структурі нефулеренових акцепторів супроводжується стабілізацією фронтірних молекулярних орбіталей. Найбільш помітні зміни спостерігаються для енергії LUMO, яка поступово знижується зі збільшенням ступеня фторування. Це пов'язано з високою електронегативністю атомів фтору та посиленням акцепторного характеру кінцевих фрагментів молекули. Зниження енергії LUMO сприяє покращенню процесів перенесення електрона та формуванню сприятливішого енергетичного узгодження між донорними та акцепторними компонентами фотоактивного шару.

Для досліджуваного ряду молекул спостерігатиметься послідовне зниження як НОМО, так і LUMO в область нижчих енергій. При цьому зміни LUMO є більш вираженими порівняно зі змінами НОМО. Внаслідок цього ширина забороненої зони дещо зменшується або залишається практично незмінною залежно від характеру перерозподілу електронної густини в молекулі.

Важливим аспектом дослідження є аналіз геометричних характеристик молекул. Ефективність внутрішньомолекулярного перенесення заряду значною мірою визначається ступенем планарності π -спряженої системи. Навіть незначні зміни дієдральних кутів між центральним ядром та кінцевими акцепторними групами впливають на делокалізацію електронної густини та положення електронних рівнів. Тому аналіз оптимізованих структур дозволяє встановити взаємозв'язок між геометричною будовою та електронними властивостями фторованих похідних ІПІС.

Передбачається, що введення атомів фтору не призводить до суттєвого викривлення спряженого каркаса молекули. Навпаки, завдяки внутрішньомолекулярним нековалентним взаємодіям типу $F \cdots S$ та $F \cdots H$ можливе часткове вирівнювання окремих структурних фрагментів, що сприяє покращенню електронного спряження вздовж молекули. Такі ефекти можуть бути однією з причин високих фотоелектричних характеристик фторованих похідних ІПІС, які широко використовуються як акцептори в сучасних органічних сонячних елементах.

Подальший аналіз результатів TD-DFT розрахунків дозволяє встановити вплив фторування на положення максимумів поглинання та характер електронних переходів. На основі отриманих даних спостерігаємо зміщення спектрів в червону область поглинання при переході від ІПІС до ІПІС-4F, що пов'язано з ефективнішою делокалізацією електронної густини та зміною енергетичної структури молекул.

Таким чином, послідовне фторування нефулеренових акцепторів сімейства ІПІС є ефективним інструментом керування їх електронними та спектральними характеристиками. Виконані квантово-хімічні розрахунки дозволяють простежити взаємозв'язок між геометричною будовою, положенням фронтірних молекулярних орбіталей та фотофізичними властивостями досліджуваних систем. Отримані результати можуть бути використані для раціонального дизайну нових високоефективних нефулеренових акцепторів для органічної фотовольтаїки.

ТЕПЛОСТІЙКІ КОМПОЗИТНІ ПОКРИТТЯ НА ОСНОВІ ФЕНОЛЬНОЇ СМОЛИ І СЛЮДИ

Сергій Рогальський, Дмитро Каменських, Олег Джужа, Віталій Євдокименко

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

e-mail: sergey.rogalsky@gmail.com

Фенолформальдегідні смоли (ФС) є найпоширенішим полімерним зв'язуючим для виготовлення теплостійких захисних покриттів завдяки високому вмісту коксового залишку після термічного розкладу, який забезпечує задовільну адгезійну міцність і низьку теплопровідність під дією високих температур. Введення до складу ФС наповнювачів, таких як слюда, кварц, азбест, вуглецеві волокна дає можливість отримувати абляційні композитні покриття, які є критично важливими для короткочасного захисту металевих поверхонь від впливу екстремальних температур [1, 2]. Зокрема, композити на основі ФС і слюди під дією відкритого полум'я утворюють ефективний термічний бар'єр, який складається із пористого вуглецю, поєднаного з шаруватою структурою слюди [3, 4]. Термічні і механічні властивості таких матеріалів

можуть варіюватись в широких межах в залежності від структури ФС і наповнювача, а також від вмісту останнього.

Метою цієї роботи було отримання теплостійких захисних покриттів на основі комерційної ФС з високим вмістом слюди і дослідження їх термічних властивостей.

В якості полімерної основи для отримання захисних покриттів використовували ФС резольного типу ЛБС-1 (ТОВ “УКРСМОЛИ”, Україна). Як наповнювач використовували мелену слюду-мусковіт. Для видалення залишків води слюду перед використанням витримували за 400 °С впродовж 4 годин.

Для виготовлення композитних покриттів до рідкої резольної смоли (РС) додавали слюду у масовому співвідношенні 1:1, 1:1.5 і 1:4 і розбавляли етанолом у кількості 20 відсотків від маси смоли. Суміші гомогенізували за допомогою змішувача Dispermat® (Німеччина). Отримані пастоподібні композиції наносили розпиленням на поверхню сталених пластин з розмірами 100×100×0,4 мм. Для формування термореактивних покриттів зразки пластин витримували в сушильній шафі за температури 160 °С впродовж 2 годин. Товщина нанесеного шару становила 0,2–0,25 мм. Для визначення теплопровідних характеристик покриттів їх нагрівали зовнішнім джерелом з однієї сторони, а градієнти зміни температури визначали за допомогою термопарного блоку, обладнаного ХА-термопарою. Інтенсивність теплового потоку створювали пропан-бутановим пальником з регульованою інтенсивністю та відстанню до поверхні впродовж 60 с.

Будову композитних покриттів досліджували методом ІЧ-спектроскопії на спектрометрі IRAffinity-1S FTIR (Shimadzu, Японія) в області 400–4000 см⁻¹. Термогравіметричний аналіз (ТГА) композитних матеріалів проводили на повітрі за допомогою термічного аналізатора DerivatographQ-1500 D (Paulik, Paulik&Erdey, MOM, Угорщина) зі швидкістю нагрівання 20 °С/хв в області температур 25–700 °С.

ІЧ-спектри композитних покриттів на основі РС і слюди наведено на рис. 1. Спектр слюди (рис. 1, спектр 1) містить слабкі смуги при 3626 і 3695 см⁻¹, які відносяться до валентних коливань зв'язків Al₂-ОН, інтенсивні смуги валентних коливань груп Si-O при 1064, 1026 і 976 см⁻¹, смугу деформаційних коливань зв'язків Al₂-ОН при 918 см⁻¹, слабкі смуги валентних коливань Al-O при 825 см⁻¹ і деформаційних коливань Si-O при 794 см⁻¹, смугу деформаційних коливань Al-O-Si при 748 см⁻¹, а також інтенсивні смуги при 524 і 462 см⁻¹, які відповідають деформаційним коливанням груп Al-O-Si і Si-O-Si [1, 2]. В ІЧ-спектрі композитного покриття, яке містить 50 % слюди (рис. 1, спектр 2) широкий пік при 3300 см⁻¹ відноситься до валентних коливань фенольних груп ОН. Слабкі смуги при 2924 і 2870 см⁻¹ відповідають симетричним і асиметричним валентним коливанням зв'язків С-Н метиленових груп. Смуги при 1612 см⁻¹ і 1504 см⁻¹ відносяться до валентних коливань зв'язків С=С фенольних кілець. Широкі смуги при 1473 і 1450 см⁻¹ відповідають деформаційним коливанням місткових груп СН₂, які поєднують фенольні кільця. Смуги при 1265 і 1234 см⁻¹ відносяться до валентних коливань зв'язків С-О фенольних кілець. Широка смуга при 1026 см⁻¹, яка перебивається зі смугою поглинання слюди при 979 см⁻¹, відноситься до коливань зв'язків С-О метилольних груп. В ІЧ-спектрі композитного покриття, яке містить 80 % слюди (рис. 1, спектр 3), інтенсивність смуг коливань зв'язків Al₂-ОН зростає.

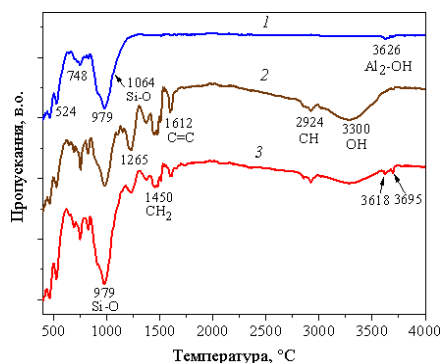


Рис. 1. ІЧ спектри: 1 – слюда, 2 – PC/слюда (50 %), 3 – PC/слюда (80 %)

Крім того, смуга при 3626 см^{-1} зміщується до 3618 см^{-1} . Це свідчить про фізико-хімічну взаємодію між слюдою і PC, зокрема утворення водневих зв'язків між групами Al-Al-OH і фенольними гідроксильними групами.

Результати термічних досліджень композитних покриттів наведено на рисунку 2. Крива ТГА композиту PC/слюда (50 %) містить дві стадії термічної деструкції. Перша стадія проходить в області температур 100–190 °C з максимальною швидкістю за 134 °C (рис. 2а). Втрата маси 2–8 % зумовлена виділенням летких продуктів додаткової поліконденсації резольної смоли (води, формальдегіду). При наступному нагріванні зразка його маса залишається незмінною до 375 °C. Друга стадія термоокислювальної деструкції (втрата маси 10–50 %) проходить в області температур 410–710 °C з максимальною швидкістю за 518 °C (рис. 2а). На цій стадії відбувається повний термічний розклад смоли. На кривій ТГА композитного покриття PC/слюда (80 %) незначна втрата маси 2–5% спостерігається в області температур 100–200 °C (рис. 2б). При наступному нагріванні маса зразка залишається стабільною до 345 °C. Основна стадія деструкції (втрата маси 5–20 %) відбувається за температур 350–550 °C з максимальною швидкістю за 470 °C (рис. 2б). Таким чином, за високого вмісту слюди (80 %) в композитах з PC термічна стійкість смоли суттєво зменшується. Це може бути зумовлено меншою густиною зшивання полімерної сітки, яка утворюється при термічному затвердженні, внаслідок фізико-хімічної взаємодії PC і слюди.

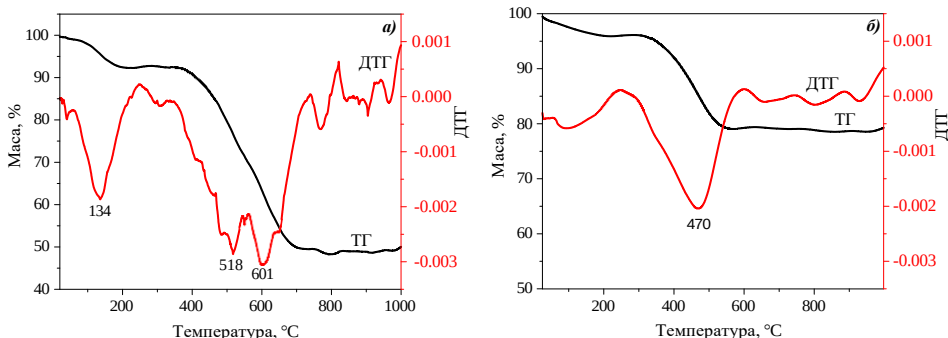


Рис. 2. Криві ТГА композитних покриттів: а – PC/слюда (50 %), б – PC/слюда (80 %)

Результати досліджень теплопровідності композитних покриттів наведено на рис. 3. Різниця температур зовнішньої сторони чистої алюмінієвої пластини (1) і пластини з покриттям PC/слода (50 %) становить близько 100 °С після нагрівання впродовж 5–10 с і 70 °С після 20–25 с. Для зразка PC/слода (60 %) різниця температур за такий же інтервал часу становить 82 °С. Захисні покриття після випробувань темніють в центрі, але не відшаровуються від поверхні і не підтримують горіння, що забезпечує їх термозахисні властивості. Отримані результати свідчать про високу ефективність композитів на основі фенольної смоли і слюди як вогнетривких захисних покриттів, яка може бути підвищена хімічною модифікацією смоли, а також збільшенням товщини шару покриття.

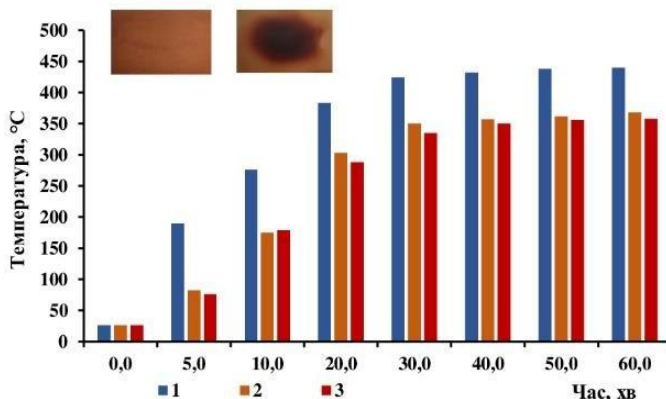


Рис. 3. Залежність температури алюмінієвих пластин від часу нагрівання: 1 – пластина без покриття, 2 – пластина з покриттям PC/слода (50 %), 3 – PC/слода (60 %)

Список використаних джерел

1. Bian L., Xiao J., Zeng J., Xing S., Yin C. *Mater.Des.* 2014, **62**, 424–429.
2. Liu Y., Jiang D., Hessien M. M., Mahmoud M. H. H., Xu M., El-Bahy Z. M. *Adv Compos Hybrid Mater.* 2024, **7**, 180.
3. Ding J., Huang Z., Luo H., Qin Y., Shi M. *Mater. Res. Innov.* 2015, **19**, S-8-440-S-8-444.
4. Yang S., Zhang S., Zhang R., Zhang J., Shen Q. *Adv. Mater.* 2025, **40**, 1231–1238.

ХІРАЛЬНО-ІНДУКОВАНА СПІНОВА СЕЛЕКТИВНІСТЬ ПРИ ДИЗАЙНІ ОРГАНІЧНИХ СВІТЛО-ВИПРОМІНЮЮЧИХ ДІОДІВ З ЦИРКУЛЯРНО ПОЛЯРИЗОВАНИМ ВИПРОМІНЮВАННЯМ

^aБорис Мінаєв, ^bПавло Стахіра, ^aОлександр Панченко, ^aВалентина Мінаєва

^a Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького, кафедра хімії та наноматеріалознавства, Черкаси, Україна

^b Національний університет "Львівська Політехніка", кафедра електронної інженерії, інститут інформаційно-комунікаційних технологій та електронної інженерії, Львів, Україна. e-mail: bfm43@ukr.net

Електронні механізми всіх ключових біологічних реакцій, що лежать в основі аеробного життя, ґрунтуються на спіновому каталізі. Це кінцевий етап перетворення води в кисень при фотосинтезі і практично зворотна реакція у циклі Кальвіна при клітинному

диханні (окиснення органічної їжі з виділенням CO_2 і води). Це процеси, які відбуваються з абсолютно очевидним порушенням правила збереження спіна в хімічних реакціях. Тут природа ніби кидає виклик всій сучасній хімічній науці, але хіміки довго мовчали, наче не помічаючи проблеми. Після створення квантової механіки та теорії Паулі хіміки відразу ж використали поняття спіна для пояснення природи ковалентного хімічного зв'язку та парамагнетизму молекули кисню – молекули, яка зрештою утворила Землю і дала початок аеробному життю на планеті. Радикально-ланцюговий механізм реакцій горіння з його простою роллю одного неспареного спіна незабаром розгадали. Але робота ферментів, що перетворюють парамагнітний кисень на діаманітну воду, ще довго залишалася загадкою.

Спіновий каталіз – глобальна проблема хімічної науки, що пронизує всі новітні галузі природознавства від квантової інформаційної технології та спінової поляризації хіральних молекул до електролюмінесценції органічних полімерів та ОЛЕДів з циркулярно-поляризованим випромінюванням. Проте хіміки досі ігнорують проблеми спінового каталізу. Навіть проста класифікація цих проблем та їх систематична теорія відсутні.

Відомо, що каталіз – це прискорення хімічної реакції при додаванні якогось каталізатора, який сам не входить у продукти реакції, але допомагає знизити енергетичний бар'єр хімічного перетворення. Спін-каталіз не обов'язково пов'язаний із введенням нової речовини, його головна риса – це зміна спінових та орбітальних характеристик хвильових функцій, що викликає зміну маршруту та бар'єру реакції. В цих тезах обговорено основні характеристики спін-каталізу та його можливу роль у молекулярній електроніці [1–5].

Кисень повітря, або триплетний кисень (молекула O_2 в основному стані $X^3\Sigma_g^-$) має електронний спін $S=1$, але через відсутність орбітального кутового моменту електронів (L_z), молекула O_2 не виявляє внутрішньої магнітної енергії, принаймні в значній помітній кількості. Оскільки $L_z=0$, спін-орбітальна взаємодія (COB) також дорівнює нулю, як і величина оператора $H_{\text{сов}}$, що спостерігається, на відміну від недіагонального матричного елемента $H_{\text{сов}}$ між основним триплетом і збудженим синглетним станом $b^1\Sigma_g^+$ [1]. Це призводить до малої енергії розщеплення триплету в рамках теорії збурень другого порядку [1, 2], що особливо не позначається на хімічній поведінці кисню, але істотно впливає на спектральні властивості і на параметри фотодинамічної терапії синглетного кисню.

Перенесення електрона від молекули донора (D) на кисень різко змінює «магнітний пейзаж» у системі супероксид іону O_2^- порівняно з O_2 [1]. Основний стан супероксид аніону має симетрію $X^2\Pi_g$. Це дублет з одним неспареним спіном, який має проекцію орбітального кутового моменту електрона на вісь молекули $L_z = 1$ (в атомних одиницях, тобто дорівнює значенню постійної Планка $\hbar/2\pi$). Взаємодія між спіновим і орбітальним кутовими моментами призводить до розщеплення $X^2\Pi_g$ стану на два рівні з повним кутовим моментом $J=3/2$ і $J=1/2$. У цьому випадку енергія розщеплення дорівнює величині матричного елемента оператора COB для π_g молекулярної орбіталі кисню. Простий розрахунок COB дає енергію розщеплення 160 см^{-1} (0.2 eV) або 19 кДж/моль для двох магнітних підрівнів $X^2\Pi_g$ стану супероксиду згідно з експериментами над іон-молекулярними пучками O_2^- [1]. Ця енергія порівняно висока; вона може бути порівняна з тепловою енергією (кВТ) і в мільйони разів перевищує магнітні збурення, типові для стандартної теорії радикальних пар (ТРП) в органічній хімії. Не дивно, що стандартна теорія РП не може бути застосована до радикальних пар типу $D^{+\bullet}\dots\text{O}_2^-$ [2]. Магнітні сили COB, які впливають на взаєморозташування спінів у триплетній та синглетній

радикальних парах настільки сильні, що можуть викликати T–S перехід і за відсутності виродження між T та S станами РП.

Дослідження, представлене в цих тезах, було профінансовано National Science Foundation (NSF) (Grant No 0124U003833).

References

1. B. F. Minaev, N. A. Murugan, H. Ågren. Dioxyspectra and bioactivation. International Journal of Quantum Chemistry, 2013, 113 (14), 1847–1867.
2. P. J. Horie, K. Ivanov, M. R. Wasielewski. Spinchemistry. J. Chem. Phys., 2020, 152, 120401.
3. Stanitska M., Deva L., Minaev B., Minaeva V., Panchenko O., Ågren H., Volyniuk D., Keruckienė R., Khomyak S., Maksymych V., Stakhira P., Gražulevičius J. V. Hetero-donors-adorned anthraquinones with near infra-red absorption for solution-processable photodetectors. Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy, 2025, 332, 125805
4. M. Engström, B. Minaev, O. Vahtras, H. Ågren. Linear response calculations of electronic g-factors and spin-rotational coupling constants for diatomic molecules with a triplet ground state. Chemical physics, 1998, 237 (1-2), 149–158.
5. B. Minaev, M. Sukhyna, P. Stakhira, V. Minaeva, H. Ågren. Unusually high spin–orbit coupling in the methionine singlet–triplet transition and the role of magnetic perturbations in amino acids. Physical Chemistry Chemical Physics, 2025, 27 (25), 13340–13351.

МОДЕЛЮВАННЯ ЧУТЛИВОСТІ ДО ТЕРТЯ ВИСОКОАЗОТНИХ ГЕТЕРОЦИКЛІВ ІЗ ВИКОРИСТАННЯМ ANN ТА GFA-ПІДХОДІВ

Роман Заболотний, Сергій Бондарчук

*Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького,
кафедра хімії та наноматеріалознавства, Черкаси, Україна
e-mail: zabolotnii.roman2221@vu.edu.edu.ua*

Чутливість до механічних впливів, зокрема до тертя (FS), є критично важливою характеристикою енергоємних сполук, зокрема високоазотних гетероциклів, що широко досліджуються як перспективні вибухові речовини наступного покоління. Традиційні експериментальні методи визначення чутливості є дорогими, небезпечними та трудомісткими, що зумовлює активний розвиток теоретичних і обчислювальних підходів до її прогнозування. Сучасні дослідження демонструють високу ефективність методів машинного навчання, зокрема глибокого навчання, проте такі підходи вимагають значних за обсягом наборів даних, що налічують сотні і навіть тисячі значень. З іншого боку використання малих наборів даних, що становить десятки значень зазвичай вимагає інформаційно дуже важливих дескрипторів, таких, які можна отримати на основі квантово-хімічних розрахунків молекул, а подекуди і кристалів неемпіричними методами, зокрема в рамках теорії функціоналу густини (DFT) [1]. Інший підхід, який гарно зарекомендував себе для малих наборів даних, це метод апроксимації генетичної функції (GFA) [2]. І хоча в обох випадках отримані емпіричні рівняння демонструють високі коефіцієнти кореляції ($R^2 = 0,96$ та $R^2 = 0,9$), тестування отриманих моделей на незалежному зовнішньому наборі даних не проводилось, а була виконана лише внутрішня перехресна валідація. Тому в рамках цієї роботи нами було перевірено результати використання методів GFA та штучних нейронних мереж (ANN) для невеликих наборів даних із незалежним зовнішнім тестуванням отриманих моделей чутливості.

Для цього нами було досліджено 90 високоазотних гетероциклічних енергоємних сполук, для яких експериментальні значення FS було взято з джерел [3, 4]. Для розбиття набору даних на тренувальний і тестовий спочатку всі дані було відсортовано за зростанням, після чого кожне 3-тє значення відбиралось у тестовий набір. Таким чином, співвідношення тренувального до тестового набору склало 67/33, що є типовим для досліджень в рамках кількісних співвідношень «структура-властивість» (QSPR). У цій роботі використані лише «швидкі» дескриптори (структурні, топологічні, інформаційні), що не вимагають значних машинних затрат, а також квантово-хімічні дескриптори на основі напівемпіричних розрахунків молекул чи солей у газовій фазі. Як результат було розраховано масив із 74 дескрипторів, для яких одержана матриця кореляції показала сильні внутрішні взаємозв'язки (рис. 1 а).

Таким чином ми провели серію регресійних аналізів методом GFA варіюючи параметри розміру популяції та коефіцієнта мутації. Числові значення всіх налаштовуваних параметрів для найкращої моделі разом з графіком використання базисних функцій в ході еволюції наведені на рис. 1 б.

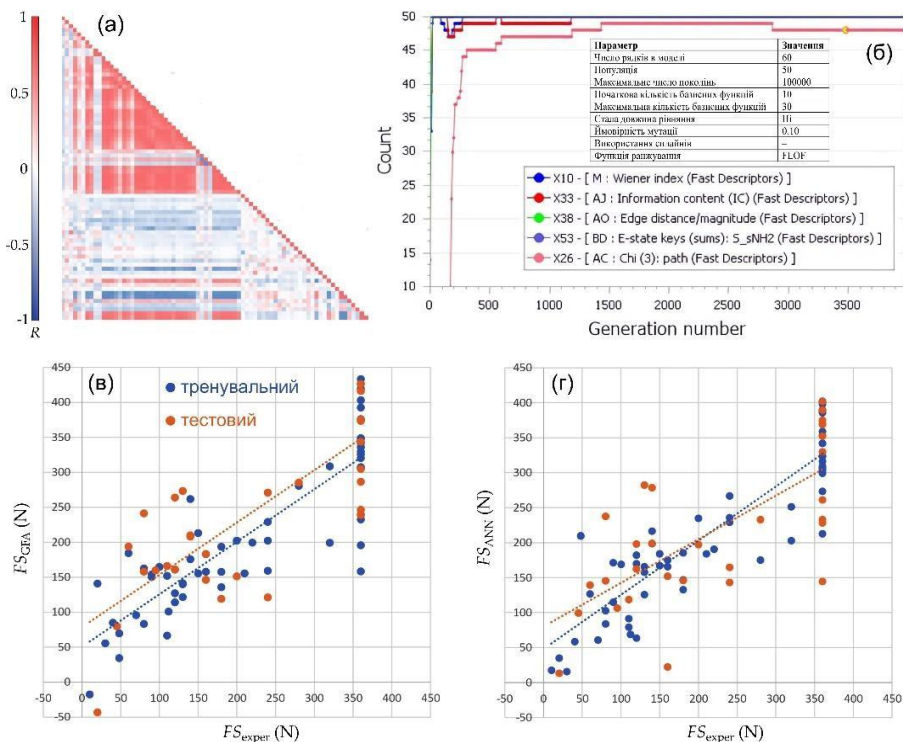


Рис. 1. Матриця взаємної кореляції дескрипторів (всього 74) (а); частота використання базисних функцій в ході еволюції та початкові параметри GFA (б); графік залежності передбачених значень чутливості до тертя розрахованих в рамках GFA (в) та ANN (г) від експериментальних

Як можна бачити з цього рисунку еволюція зайняла всього близько 4000 поколінь і інформаційно важливі дескриптори були знайдені практично відразу. З іншого боку нами було застосовано метод ANN, архітектура якої є наступною: 68–3–1. Тут нами було застосовано метод оптимізації BFGS (Broyden–Fletcher–Goldfarb–Shanno), що має низку переваг над рештою методів навчання мережі і які добре описані в недавній роботі [5]. Всі розрахунки проводились з використанням програмного комплексу Materials Studio 2023 [6]. Графічно результати передбачення чутливості до тертя обома методами (FS_{GFA} та FS_{ANN}) зображено на рис. 1 в, г, а результати статистичної обробки похибок передбачення наведені у таблиці.

Таблиця.

Статистичні оцінки точності передбачення значень FS методами GFA та ANN

Параметр	GFA		ANN	
	Тренувальний	Тестовий	Тренувальний	Тестовий
R^2	0,73	0,59	0,79	0,51
R^2_{CV}	0,69	–	0,3	–
MAE	46	69	43	66
RMSE	63	82	57	88

Як можна бачити з таблиці статистичні оцінки похибок передбачення, такі як коефіцієнт кореляції (R^2) та перехресно-валідований R^2 (R^2_{CV}), середнє значення модуля абсолютної похибки (MAE) та середньоквадратичне відхилення (RMSE) є досить близькими для обох методів передбачення. Різниця між R^2 та R^2_{CV} для методу GFA не перевищує 0,2, що говорить про малу ймовірність перенавчання моделі (рівняння 1). Варто також відзначити, що для методу ANN ця різниця є значною (0,49), проте слід пам'ятати що нейронні мережі вимагають значно більшого обсягу даних для навчання і у даному випадку відтворюваність самої моделі продемонстрована на досить добрих значеннях статистичних оцінок результатів для тестового набору (таблиця). Значення MAE для тестового набору є досить близькими для обох методів і становлять 66–69 Н, при цьому метод ANN демонструє трохи краще передбачення.

$$\begin{aligned}
 FS_{GFA} = & 1.094WI - 96.289IC + 186.482\chi(3) : path + 160.058\chi(1) : val. mod. - \\
 & 494.075IC - 419.179CIC - 0.343ED + 11.605S_{sNH} - 42.319S_{aasN} - \\
 & 9.807S_{aaO} + 1134.522,
 \end{aligned} \quad (1)$$

де WI – індекс Вінера; IC – інформаційний контент; CIC – додатковий інформаційний контент; ED – відстань від краю.

Таким чином, приймаючи до уваги, що експериментальні значення FS , визначені за стандартом BAM (Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung), часто мають дискретний характер і представлені обмеженим набором значень (наприклад, більше 120, 240, 360 Н, тощо), що призводить до формування кластерів даних замість безперервного розподілу. Така дискретизація обумовлює наявність внутрішньої «шумової межі» точності, яка, за оцінками літературних джерел, становить приблизно 20–50 Н, навіть без урахування додаткових експериментальних похибок. У цьому контексті досягнута точність прогнозування на рівні $MAE \approx 66$ Н для тестового набору з 30 сполук може розглядатися як задовільна та такою, що відповідає сучасному рівню моделей, особливо з урахуванням складності опису високоазотних систем і обмеженої роздільної здатності експериментальних даних.

Список використаних джерел

1. H.-Y. Li, W. Zeng, F.-S. Liu, Z.-T. Liu, Z.-X. Bai, Q.-J. Liu. Theoretical study of friction sensitivity of energetic materials. *J. Phys. Chem. Solids*, 2025, 202, 112692
2. S. V. Bondarchuk. Friction sensitivity of nitramine energetic materials: a prediction based on genetic function approximation. *Fire Phys Chem* 2022, 2 (3), 272-278.
3. H. Gao, J. M. Shreeve. Azole-based energetic salts. *Chem. Rev.* 2011, 111 (11), 7377–7436.
4. H. Gao, Q. Zhang, J. M. Shreeve. Fused heterocycle-based energetic materials (2012–2019). *J. Mater. Chem.* A2020, 8, 4193–4216.
5. Z. Zhang L. Wen T. Yu, C. Chen, S. V. Bondarchuk, Y. Liu. “Unraveling the Tangle” of calculated solid-state enthalpies of formation of C–H–N–O energetic materials with a high-precision approach based on the predicted asymmetric cell total energy evaluation. *Fuel* 2026, 404, 136307.
6. Materials Studio 2023; Dassault Systèmes BIOVIA, San Diego, CA, 2023.

ПРОГНОЗУВАННЯ ТОКСИЧНОСТІ ОРГАНІЧНИХ РЕЧОВИН ЗА ДОПОМОГОЮ МЕТОДІВ МАШИННОГО НАВЧАННЯ

Анастасія Комкова, Сергій Бондарчук

Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького
e-mail: komkova.anastasiia2222@vu.cdu.edu.ua, bondchem@cdu.edu.ua

Оцінка токсичності нових хімічних сполук є обов'язковою для багатьох галузей (фармацевтика, харчова, сільськогосподарська, промислова тощо). Комп'ютерні методи є сучасною альтернативою класичним тестам, оскільки вони замінюють дослідження на тваринах, здешевлюють процес і прискорюють пошук безпечних речовин [1].

Моделювання базується на принципі QSAR – математичному прогнозуванні біологічної/токсичної дії невідомих молекул на основі аналізу їхньої хімічної структури та властивостей.

Основою дослідження стали дані, наведені у статті [2], присвяченій прогнозуванню гострої пероральної токсичності пестицидів для американської перепілки.

З архівів EFSA Open Food Tox, EPA ECOTOX Knowledgebase та PPDB узято значення токсичності з параметрами: пероральне введення, гострий характер впливу та тривалість спостереження не менше 14 днів. Попередня фільтрація виключила неорганічні речовини, полімери, суміші, дублікати та сполуки з неповними даними, що забезпечило вибірку тільки з органічних пестицидів – 199 сполук. Гетерогенність вибірки була високою й охоплювала всі категорії токсичності за GHS [3].

Для побудови моделі сформовано вибірку зі 199 органічних пестицидів, закодованих у форматі SMILES. Перед побудовою моделі провели статистичний аналіз набору даних. За допомогою інструментів Excel перевірили вибірку на промахи і візуалізували розподіл даних через коробковий графік (рис. 1).

За результатами графічного аналізу та додаткової перевірки методом стандартизованої оцінки z-балами, зробила висновок, що речовини, які мають значення $LD_{50} = 5000$ мг/кг маси тіла (2 молекули); $LD_{50} = 7000$ мг/кг маси тіла (1 молекула) й $LD_{50} = 4400$ мг/кг маси тіла (1 молекула) є промахами. Такі дані вважаються нерепрезентативними для загального набору даних, але ми вирішили перенести їх у зовнішній тестовий набір, щоб перевірити перспективність в розрахунку для структурно нетипових молекул.

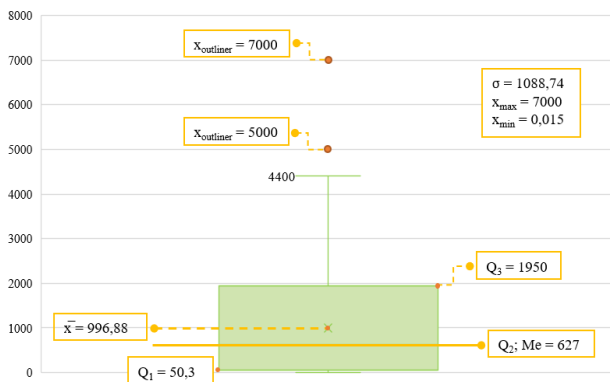


Рис. 1. Статистичний розподіл значень LD_{50} для вибірки зі 199 сполук

Для побудови моделі використовували метод апроксимації генетичної функції (GFA), який нещодавно продемонстрував свою ефективність у передбаченні водної токсичності високоазотних сполук до *Aliivibrio fischeri* [4]. Масив даних був розбитий на тренувальний і тестовий набори (150/49) й всі налаштовані параметри GFA наведені у таблиці 1:

Таблиця 1.

Початкові параметри регресійного аналізу методом GFA

Розмір популяції	70
Максимальна кількість поколінь	100000
Початкові члени рівняння	20
Максимальна довжина рівняння	35
Стала довжина рівняння	Ні
Ймовірність мутації	0.1
Лінійні сплайни	Так
Функція ранжування	Fridman LOF

У ході регресійного аналізу отримано рівняння:

$$LD_{50} = -28.663 \cdot S_{ssO} - 217.088 \cdot \langle AlogP + 0.84 \rangle - 242.56 \cdot \langle Balaban\ index\ JY - 2.15 \rangle + 366.526 \cdot \langle \chi(3):cluster - 1.0868 \rangle + 1955.17 \cdot \langle S_{aaaC} - 1.567 \rangle - 242.42 \cdot \langle 13.785 - \chi(1) \rangle + 212.461 \cdot \langle 9.118 - \chi(3):path \rangle + 2120.366$$

де S_{ssO} – атоми Оксигену, які з'єднані з молекулою двома одинарними зв'язками; $AlogP$ – коефіцієнт розподілу октанол/вода (показник ліпофільності); $Balabanindex\ JY$ – індекс ступеня розгалуженості вуглецевого скелета молекули; $\chi(3):cluster$ – індекс молекулярної зв'язності 3-го порядку (3 зв'язки сходяться в один вузол); S_{aaaC} – карбону, які знаходяться всередині ароматичного кільця і сполучені трьома ароматичними зв'язками; $\chi(1)$ – індекс одинарних зв'язків між неконденсованими атомами й показує розмір та площу поверхні молекули; $\chi(3):path$ – індекс молекулярної зв'язності 3-го порядку, який оцінює лінійність ланцюжків сформованих чотирма послідовно зв'язаними атомами.

Якість побудованої моделі оцінювалася порівнянням коефіцієнтів (R^2). Близькість

значень коефіцієнтів детермінації ($R^2 = 0,46$), перехресної валідації ($R^2_{\text{кв}} = 0,42$) та скоригованого коефіцієнта ($R^2_{\text{скуп}} = 0,43$) свідчить про те, що модель не перенавчена і надійна. Також це підтверджується критерієм Фішера, який значно вищий ($F = 17,12$) за порогове значення, яке дорівнює 2,08 при довірчій ймовірності 95 %. Тобто рівняння регресії є статистично значущим й придатне для прогнозування.

Перший графік було навмисно побудовано з викидами й коефіцієнт детермінації для прогнозу становив 0,11 відносно експериментального ряду для якого $R^2 = 0,84$. Напрямок лінії тренду підтверджує, що у ході аналізу, модель змогла визначити ключові закономірності й задовільно прогнозує загальну тенденцію як низьких, так і високих значень токсичності. Коефіцієнти ймовірно можна збільшити видаливши викиди, які погіршують загальне значення показників. Відповідність між експериментальними й прогнозованими показниками LD_{50} з виключенням промахів візуалізовано на графіку:



Рис. 2. Порівняльний аналіз експериментальних та прогнозованих значень LD_{50} пестицидів за отриманою QSAR-моделлю без показу викидів

Математичні параметри моделі значно покращилися після вилучення нетипових значень, які порушували критерії загальної хімічної однорідності вибірки. На графіку (рис. 2) коефіцієнт детермінації для прогнозу збільшився до 0,72 при експериментальному $R^2 = 0,84$. Також, можна зробити висновок, що модель найкраще описує речовини значення LD_{50} яких знаходиться приблизно в діапазоні 0–2000 мг/кг, що не є дивним, бо загальна вибірка включала найбільше сполук зі значеннями саме у цьому інтервалі токсичності. Значення 4400, 5000 й 7000, які класифіковані як викиди були розраховані не коректно через те, що у моделі було недостатньо матеріалу для навчання з цього проміжку.

Це говорить про те, що рівняння, яке було отримано у ході регресійного аналізу можна вільно використовувати для попереднього скринінгу або грубої експрес-оцінки й доводить те, що з вибірки варто виключати викиди, щоб результати були точніші й мали кращу відтворюваність.

Список використаних джерел

1. Tonoyan L., Siraki A. G.. Machine Learning in Toxicological Sciences: Opportunities for Assessing Drug Toxicity. *Front. Drug Discov.* – 2024. – Vol. 4. – Article: 1336025.
2. Iovine N., Roncagliani A., Benfenati E. Predicting Acute Oral Toxicity in Bobwhite Quail: Development of QSAR Models for LD_{50} . *Environments* – 2025. – Vol. 12, № 2. – Article: 56.
3. Globally Harmonized System of Classification and Labelling of Chemicals (GHS). Tenth revised edition. ST/SG/AC.10/30/Rev.10. New York and Geneva : United Nations, 2023. 592 p. URL: <https://unece.org/transport/dangerous-goods/ghs-rev10-2023>
4. Bondarchuk S. V.. Prediction of aquatic toxicity of energetic materials using genetic function approximation. *Fire Phys Chem* – 2023. – Vol. 3, № 1. – P. 23-28.

ТЕОРЕТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ВЗАЄМОДІЇ СИНГЛЕТНОГО ТА ТРИПЛЕТНОГО КИСНЮ З АНТРАЦЕНОМ

Діана Мусієнко, Борис Мінаєв

Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького

e-mail: dmusienko446@gmail.com

Молекулярний кисень бере участь у безлічі хімічних та біологічних процесів. Попри свій простий хімічний склад, молекула O_2 має незвичайні електронні властивості, які визначають її унікальну реакційну здатність. Основний електронний стан O_2 – триплетний, тоді як більшість стабільних сполук, у тому числі органічних, існують у синглетному стані (спарені електрони з протилежними спінами). Як наслідок, прямі реакції триплетного кисню з органічними молекулами заборонені за спіном. Багато фотофізичних і фотохімічних процесів за участю кисню відбуваються за рахунок утворення його активних форм [1].

Активні форми кисню – це група взаємоперетворюваних, високореактивних форм O_2 , більшість із яких існують лише протягом короткого часу. Серед них виділяють вільні радикали – супероксид-іон ($O_2^{\bullet-}$), гідроксильний радикал ($OH^{\bullet}$), пероксидні радикали ($RO_2^{\bullet}$ тощо), а також нейтральні молекули, такі як перекис водню (H_2O_2), синглетний кисень (1O_2) та інші. Синглетний кисень – найнижчий збуджений електронний стан O_2 – відомий науковій спільноті вже майже сто років. Збудження молекули кисню до синглетного стану знімає заборону за спіном, і O_2 може швидко реагувати з органічними сполуками [2].

Синглетний кисень використовують у промисловості, органічному синтезі, екології та медицині, зокрема у фотодинамічній терапії (ФДТ), де він діє як основний цитотоксичний агент, що пошкоджує клітини пухлин. Однак обмежений вміст кисню в гіпоксичних пухлинах знижує ефективність утворення синглетного кисню. Щоб вирішити цю проблему, вчені шукають молекулярні системи, здатні уловлювати, зберігати та контролювано вивільняти синглетний кисень [4].

Серед ароматичних вуглеводнів антрацен є одним із найбільш досліджених у взаємодії з синглетним киснем: відомо, що в результаті реакції циклоприсєднання [4+2] утворюється антрацен-9,10-ендопероксид. Реакція оборотна, тобто антрацен та його похідні здатні захоплювати, накопичувати та вивільняти синглетний кисень, завдяки чому їх називають «акумуляторами» синглетного кисню. Цю властивість використовують у молекулярній електроніці (в сенсорних технологіях), а також у медицині для лікування раку (як утримувач синглетного кисню для ФДТ). З огляду на це предметом дослідження обрано взаємодію синглетного та триплетного кисню з антраценом.

Побудований комплекс антрацен- O_2 оптимізовано за допомогою теорії функціоналу густини (DFT) на рівні B3LYP/6-31G(d,p) у вакуумі та в розчині тетрагідрофурану. Для обчислень обрано гібридний обмінно-кореляційний функціонал B3LYP, оскільки він забезпечує прийнятний баланс між складністю обчислень та точністю для органічних π-спряжених систем і широко використовується в дослідженнях ароматичних вуглеводнів, кисневмісних сполук та їхніх збуджених станів.

Розрахована частота коливань $O=O$ ($1587,85\text{ см}^{-1}$) добре погоджується з експериментальним значенням $1580,16\text{ см}^{-1}$ [5], це показує, що обрана методологія досить точно відтворює коливальні властивості молекулярного кисню. Між синглетним і триплетним станами виявлено суттєві відмінності. Дипольний момент синглету ($2,5506\text{ Д}$) перевищує дипольний момент триплету ($0,0944\text{ Д}$) більш ніж на порядок, це вказує на

сильнішу поляризацію та перерозподіл електронної густини в присутності синглетного кисню.

Розрахунок збуджених станів проведено методом теорії функціоналу густини, що залежить від часу (TDDFT). Основні визначені переходи, їхні енергії збудження, довжини хвиль, сили осциляторів та записи хвильових функцій, що відображають домінуючі внески орбіталей, наведено в таблиці. Найнижчий триплетний збуджений стан (T_1) отримано при 779,9 нм, вінописується основним переходом $54 \rightarrow 56$. Найнижче синглетне збудження (S_1) з'являється при 765,2 нм і відповідає збудженню $HOMO \rightarrow LUMO$ ($55 \rightarrow 56$). Обидва переходи мають нульову силу осцилятора і тому мало впливають на спектр поглинання.

Таблиця.

Основні розраховані електронні переходи для збуджених електронних станів комплексу антрацен- O_2

Стан	E , eV	λ , нм	f	Хвильова функція
T_1	1,5899	779,9233	0	$0,87(55-56)+0,52(56-55)$
S_1	1,6204	765,2431	0	$-0,86(54-56)-0,49(56-54)$
S_2	2,8545	434,4018	0,0806	$0,74(55-56)-0,22(56-55)$
S_5	4,5812	270,6714	0,0598	$0,69(55-57)+0,14(50-56)$
S_6	4,5964	269,7763	0,0170	$0,70(54-57)$
S_7	5,0377	246,1441	0,0374	$0,70(51-56)$
S_8	5,138	241,3390	0,0210	$0,69(50-56)-0,14(55-57)$

Перший оптично дозволений перехід спостерігається при 434,4 нм ($f = 0,0806$). Додаткові смуги поглинання спостерігаються при 270,7; 269,8; 246,1 та 241,3 нм. Спектр поглинання, побудований на основі розрахункових даних, представлений на рис 1. Добре видно, що у спектрі переважають синглетні збуджені стани, тоді як триплетні залишаються переважно «темними».

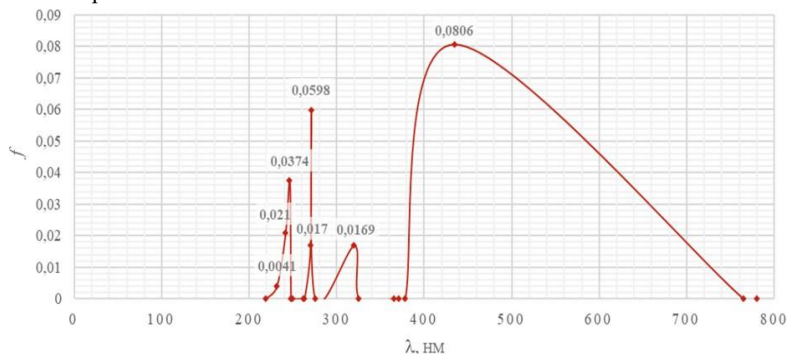


Рис. 1. Спектр поглинання в УФ/видимому діапазоні, розрахований методом TD-DFT

Аналіз молекулярних орбіталей показує, що найнижче триплетне збудження локалізоване переважно на молекулі кисню. Натомість оптично активні переходи пов'язані з заповненням $LUMO$ та $LUMO+1$ і характеризуються перерозподілом електронної густини між π -системою антрацену та $\pi(g)$ -МО O_2 . Основні молекулярні орбіталі, між якими переходять електрони в цих станах, наведено на рис. 2.

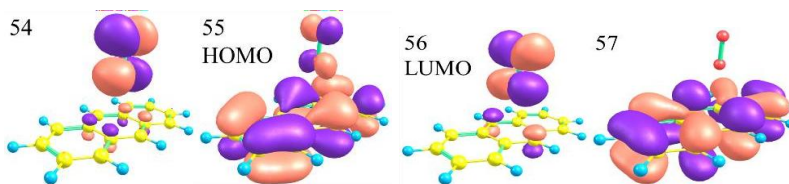


Рис. 2. Граничні молекулярні орбіталі комплексу O_2 –антрацен

Отже, переходи, що відповідають виявленим смугам поглинання, можна інтерпретувати як перенесення заряду та збудження $\pi \rightarrow \pi^*$ в комплексі антрацен– O_2 . Збудження, що йдуть переважно на π -системі антрацену (55 $\rightarrow$ 57), відповідають синглетним станам, тому, що це основний стан молекули антрацену. Інші переходи пояснюються тим, що наявність молекулярного кисню поблизу ароматичного кільця зумовлює перенесення заряду: електрон тимчасово переходить з антрацену до O_2 . Ці стани можуть мати змішаний характер.

Інтеркомбінаційна конверсія (перехід без випромінювання між станами різної мультиплетності) посилюється парамагнетизмом молекулярного кисню, при зіткненні з молекулою антрацену відбувається спін-орбітальна взаємодія, і магнітний момент кисню порушує заборону за спіном [6]. Як наслідок, спочатку утворені синглетні стани гасяться, що призводить до утворення триплетних станів. Дійсно, перший (T_1) і нульовий (T_0) розраховані стани є триплетними. Таким чином іде гасіння характерних смуг флуоресценції антрацену (довгі УФ-хвилі близько 320–370 нм), що можна побачити на спектрі. В подальшому буде детальніше досліджено вплив згаданих вище фотофізичних процесів на характер збуджених станіву взаємодії O_2 та ароматичних сполук.

Список використаних джерел

1. B. Minaev, *Biomed J. Sci & Tech Res*, 2021, 38(4), 30462–30472.
2. P. R. Ogilby, *Chem. Soc. Rev.*, 2010, 39, 3181–3209.
3. J. Al-Nu'airat, M. Altarawneh, I. Oluwoye, X. Gao, B. Z. Dlugogorski, *Energy Fuels* 2018, 32(12), 12851–12860.
4. Y.-Q. He, J.-H. Tang, *Adv. Healthcare Mater.*, 2025, 14, 2403009.
5. NIST Computational Chemistry Comparison and Benchmark Database, URL: <https://cccbdb.nist.gov/exp2.asp?casno=7782447>
6. N. J. Turro, *Tetrahedron*, 1985, 41(11), 2089–2098.

ГЕНЕРАТИВНИЙ ШТУЧНИЙ ІНТЕЛЕКТ У DE NOVO ДИЗАЙНІ ФЕРМЕНТІВ: СУЧАСНІ ДОСЯГНЕННЯ ТА ПЕРСПЕКТИВИ

Вероніка Панашенко, Богдана Валішкевич

Івано-Франківський національний медичний університет

м. Івано-Франківськ, Україна

email: veronikapan13@gmail.com

Актуальність. Створення ферментів із запрограмованими властивостями є фундаментальним завданням біохімії. Традиційна інженерія білків вимагала ресурсозатратних

лабораторних скринінгів і обмежувалася рамками існуючих у природі структур. Револьюційним проривом стала розробка генеративних AI-моделей (зокрема RFdiffusion2), які дозволяють проєктувати принципово нові макромолекули безпосередньо з обчислювальних описів активних центрів. Здатність сучасних алгоритмів створювати ферменти з високою початковою каталітичною активністю та суттєво скорочувати потребу в подальшій експериментальній оптимізації долає еволюційні обмеження та відкриває безпрецедентні горизонти для медицини, біотехнологічної промисловості й вирішення екологічних проблем.

Метою дослідження є теоретичний аналіз сучасних підходів до обчислювального *de novo* дизайну ферментів із застосуванням генеративного штучного інтелекту, оцінка ефективності моделі RFdiffusion2.

Матеріали і методи. Проведено аналітичний огляд та узагальнення сучасних досліджень у виданнях *Science*, *Nature* та *NatureMethods* за 2025–2026 роки.

Результати. Генеративні AI-моделі (зокрема RFdiffusion2) здатні створювати білкові структури, спираючись безпосередньо на механізм самої хімічної реакції. Це усуває необхідність вручну задавати точні позиції амінокислот, як це здійснювали в попередніх підходах. Алгоритм автоматично формує оптимальну просторову конфігурацію ферменту, забезпечуючи ефективне розташування каталізуючих залишків у межах активного центру. Для оцінки функціональності спроектованих білків на різних етапах реакції використовують спеціалізовані нейромережі (ChemNet та PLACER). Вони моделюють поведінку активного центру та дозволяють відбирати найбільш перспективні конструкції ще до проведення лабораторних досліджень, що суттєво скорочує часові та матеріальні витрати.

Практична ефективність даного підходу продемонстрована під час створення різних типів ферментів, зокрема серинових, цистеїнових і цинкових гідролаз. Розроблені *de novo* біокатализатори продемонстрували високу каталітичну активність, яка в окремих випадках наближалася до показників природних аналогів та суттєво перевищувала ефективність більшості раніше створених штучних ферментів. Лабораторні дослідження підтвердили, що експериментально визначені структури характеризуються високим ступенем відповідності розрахунковим моделям. При цьому їхня просторова архітектура не має відомих природних аналогів серед описаних білкових структур.

Висновки. Комплексне використання інструментів штучного інтелекту формує нову парадигму створення ферментів. Застосування генеративних моделей дозволяє здійснювати раціональний дизайн високоактивних біокатализаторів із новими структурними характеристиками та значно скорочувати обсяг подальшої лабораторної оптимізації. Це відкриває широкі перспективи для розробки білків медичного, промислового та біотехнологічного призначення.

Список використаних джерел

1. Lauko A., Pellock S.J., Sumida K.H., et al. Computational design of serine hydrolases. *Science*. 2025; 388: eadu2454. doi: 10.1126/science.adu2454.
2. Kim D., Woodbury S.M., Ahern W. et al. Computational design of metallohydrolases. *Nature*. 2026; 649:246-253. doi: 10.1038/s41586-025-09746-w.
3. Ahern W., Yim J., Tischer D. et al. Atom-level enzyme active site scaffolding using RFdiffusion2. *Nature Methods*. 2026; 23:96-105. doi: 10.1038/s41592-025-02975-x.
4. Watson J.L., Juergens D., Bennett N.R., et al. De novo design of protein structure and function with RFdiffusion. *Nature*. 2023; 620(7975):1089-1100. doi: 10.1038/s41586-023-06415-8.

ELECTROCHEMICAL, SPECTROSCOPIC, AND DFT INVESTIGATION OF A PYRIDINE-MODIFIED PHENOTHIAZINIUM PHOTOSENSITIZER

Nataliya Karaush-Karmazin¹, Daniel Swoboda², Marek Beneš^{3,4}, Eliška Jiroušková³, Lucie Dostálková³, Radosław Podsiadły⁵, Romana Sokolová³, and Jacek E. Nycz²

¹ Department of Chemistry and Nanomaterials Science, Bohdan Khmelnytsky National University, 18031 Cherkasy, Ukraine

² Institute of Chemistry, Faculty of Science and Technology, University of Silesia in Katowice, ul. Szkolna 9, PL-40007 Katowice, Poland

³ J. Heyrovský Institute of Physical Chemistry of the Czech Academy of Sciences, Dolejškova 3, 182 00 Prague, Czech Republic

⁴ Department of Analytical Chemistry, University of Chemistry and Technology in Prague, Technická 5, 160 00 Prague, Czech Republic

⁵ Institute of Polymer and Dye Technology, Faculty of Chemistry, Lodz University of Technology, Stefanowskiego 12/16, 90-924 Lodz, Poland
e-mail: karaush22@ukr.net

Phenothiazinium dyes are widely used as photosensitizers in photodynamic antimicrobial chemotherapy, electrochemical sensing, and textile applications. Methylene blue (**MB**⁺) is one of the most extensively studied representatives due to its strong absorption in the therapeutic window (600–800 nm) and efficient generation of reactive oxygen species (ROS). However, limitations in photostability and lipophilicity motivate the development of new derivatives. In this work [1], we investigate a newly synthesized pyridine-modified phenothiazinium derivative, **QMB**⁺ (Fig. 1), and compare its electrochemical, spectroscopic, and electronic properties with those of **MB**⁺.

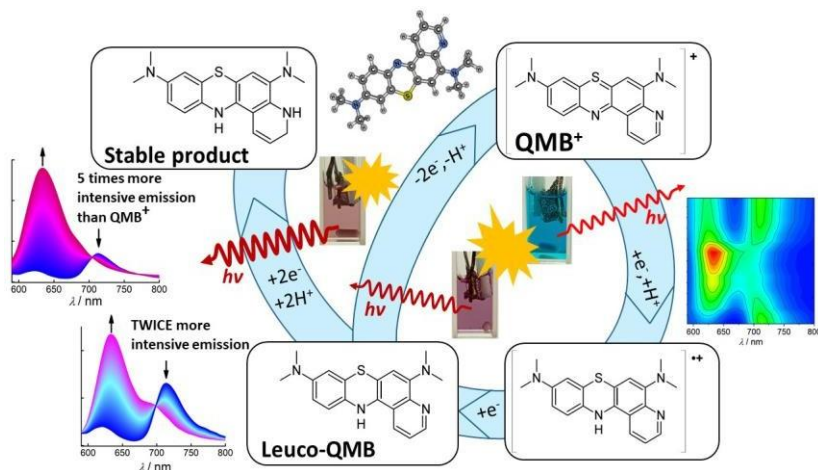


Fig. 1. Proposed photoredoxcycle and redox-induced fluorescence switching of **QMB**⁺ revealed by spectroelectrochemistry and density functional theory (DFT) calculations

Electrochemical studies demonstrated that **QMB**⁺ undergoes a reversible electron-proton coupled reduction process [1]. The first reduction leads to the formation of a violet radical intermediate (**QMB**[•]), while the second reduction yields leuco-QMB. In contrast to leuco-MB, the leuco-QMB remains colored because of the additional pyridine chromophore. The reduction process is facilitated by proton donors, which shift the reduction potential toward more positive values.

In situ fluorescence spectroelectrochemical measurements revealed unique emission behavior during reduction. The original fluorescence band of **QMB**⁺ at 713 nm gradually decreased, while a new emission band appeared at 633 nm. The reduced species retained strong red emission and exhibited an approximately five-fold increase in fluorescence intensity compared to the parent cation (Fig. 1). These observations indicate that **QMB**⁺ preserves emissive properties throughout its catalytic redox cycle.

The molecular orbital distributions showed that the HOMO is mainly localized on the phenothiazine core in both dyes, while the LUMO of **QMB**⁺ extends toward the fused pyridine ring [1]. This additional delocalization stabilizes the electronic structure and contributes to the observed bathochromic shift of the absorption spectrum. The calculated HOMO-LUMO energy gap of **QMB**⁺ (2.39 eV) is slightly smaller than that of **MB**⁺ (2.40 eV), which supports the experimentally observed red-shifted absorption and emission characteristics.

The natural charge distribution for **MB**⁺ and **QMB**⁺ in Figure 2 demonstrated a more delocalized charge distribution in **QMB**⁺. The strongly electron-rich pyridine nitrogen atom plays a role in charge stabilization and provides additional sites for protonation and intermolecular interactions. This enhanced delocalization explains the increased stability of **QMB**⁺ and its distinct redox behavior. Upon one-electron reduction, the radical intermediate **QMB**[•] exhibits significant spin and charge delocalization over the phenothiazine and pyridine fragments. Further reduction leads to the formation of leuco-QMB and stable product (P1), accompanied by disruption of the aromatic π -conjugated system and increased molecular distortion. The calculated electronic structure of P1 indicates a larger HOMO-LUMO energy gap and pronounced intramolecular charge-transfer character, which reduces non-radiative relaxation pathways and promotes fluorescence emission.

This explains the spectroelectrochemical observations, where reduction of **QMB**⁺ results in the appearance of a new emission band at 633 nm and an almost five-fold enhancement of fluorescence intensity [1]. Overall, the DFT and time-dependent (TD) DFT calculations demonstrate that incorporation of a pyridine moiety into the phenothiazinium framework significantly stabilizes the electronic structure, modifies the redox properties, and enables efficient redox-controlled fluorescence switching while preserving red-light emission.

The **QMB**⁺ possesses significantly higher photostability than **MB**⁺ under irradiation at 575 nm, remaining stable for at least 3000 s [1]. Although the singlet oxygen quantum yield of **QMB**⁺ was lower than that of **MB**⁺, its enhanced stability and expected higher lipophilicity make it a promising candidate for biological and photochemical applications.

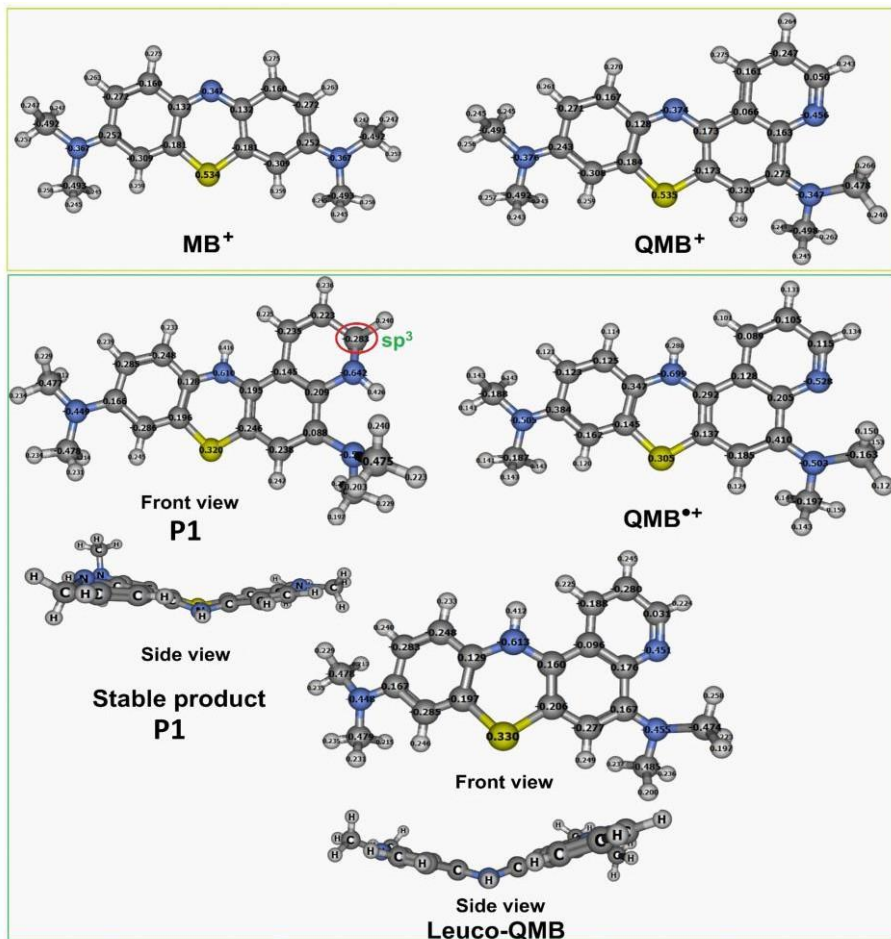


Fig. 2. The natural charge distribution for **MB⁺** and **QMB⁺**, as well as the products formed by **QMB⁺** during redox processes, was calculated at the B3LYP/6-31G(d,p) level of theory.

References

1. D. Swoboda, M. Beneš, E. Jiroušková, L. Dostálková, R. Podsiadly, N. Karaush-Karmazin, R. Sokolová, J. E. Nycz, A pyridine-modified phenothiazinium photosensitizer: Electrochemical and spectroscopic behaviour upon electron transfer, *Electrochim. Acta*, 2026, 553, 148198. DOI: 10.1016/j.electacta.2026.148198

МІКРОТВЕРДІСТЬ КОМПОЗИТИВ НА ОСНОВІ ЕПОКСИДНОЇ СМОЛИ З МІКРОКВАРЦОМ

Дмитро Старокадомський^{1,3}, Андрій Мельник^{3,4}, Ольга Радченко⁴,
Ольга Качоровська⁵, Марія Решетник⁶

¹Інститут хімії поверхні ім. О.О.Чуйка НАНУ

²Інститут геохімії, мінералогії та рудоутворення ім. М. П. Семененка НАНУ

³Київська Мала Академія Наук

⁴Український фізико-математичний ліцей КНУ ім. Т. Шевченка

⁵Національний технічний університет України

«Київський Політехнічний Інститут ім. Ігоря Сікорського»

⁶Національний Науково-Природничий Музей НАНУ, Київ, Україна

e-mail: km80@ukr.net

Нині епоксидні смоли використовуються для виробництва композитних матеріалів, зварювання, герметизації та багатьох інших застосувань. Проте, вони не є дешевим матеріалом. Саме тому, зазвичай їх змішують з різними сумішами, наприклад, мікрокварцом. Мікрокварц (мК) – це міцна, декоративна та водонепроникна мінеральна система покриття, що складається переважно з уламків мінералу кварцу (діоксиду кремнію, силіцій (IV) оксиду SiO_2) що є одним з найпоширеніших мінералів в земній корі з відносно дешевою ціною. Тому, метою роботи є встановити можливості кварцового піску як дешевого та потенційно посилюючого наповнювача епоксидних смол, з можливістю створення доступних імпортозамінних полімерних композитів для будівництва, побуту, сервісу та промисловості.

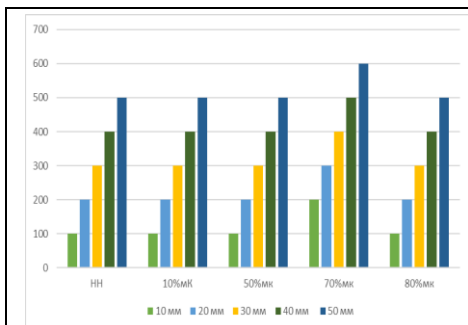
Мікрокварц «маршаліт» отримують подрібненням кварцових порід (кварцитів і т.д.) – є кварцовою мукою з середнім розміром часток 50 мкм. Фактично це «молоте кварцове скло», яке при додаванні в смоли має давати склоподібні чи камнеподібні пластики. В літературі можна зустріти інформацію про епокси-кварцові [1, 2], поліефірно-кварцові [3, 4, 7] та інші полімер-кварцові композиції [5]. У [1] вивчали епокси-кварцові композиції методом інфрачервоної спектроскопії (ІЧ). Основним спостережуваним ефектом була ерозія та видалення епоксидної смоли з поверхні зразків, пропорційно часу обробки розрядом та відстані від голки (з якої йшов розряд). Поряд з ерозією, на поверхні, що зазнала впливу повітряно-плазмової дії, були виявлені нові хімічні сполуки (можливо, оксалатні солі). У роботі бразильських вчених [2] розроблено методи обробки та абразивних випробувань композитів на основі системи епоксидна смола-кварц (70, 75, 80, 85 та 90 мас %). Метою було оцінити їх технологічне застосування як абразивних коронок для полірування декоративних порід. Зроблено висновок про позитивну технічну придатність цього «нового композиту» для використання в промисловості декоративних порід. Слід відмітити, що в нашій практиці не вдавалося додати більш як 80 мас % мікрокварцу. Також автори [3] дослідили динамічні властивості епоксикомпозитів з кварцовою пудрою. В інтернеті наявна велика кількість комерційних заміток та оглядів від профільних виробничих фірм [6]. З них можна отримати багато візуально інформації про естетичні та декоративні властивості епокси-кварцових матеріалів.

1. *Мікротвердість по Брінеллю звичайних зразків.* Можна сказати, що мікротвердість 70 % зразка з мікрокварцом краща за будь-який інший не оброблений зразок (рис. 1.1).

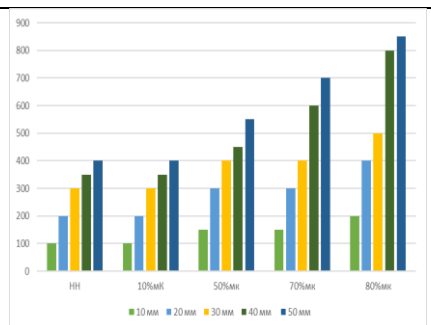
2. *Мікротвердість по Брінеллю після нагріву 120 °С.* – для ненаповненого (НН) і з 10 мас % мікрокварцу (мК) майже не змінилася лише трохи послабилася при глибшому

тиску. Тоді як показники з 50 % МК отримали незначне збільшення, а 70 % МК та 80 % МК підвищили свою мікротвердість майже вдвічі. (рис. 1.2).

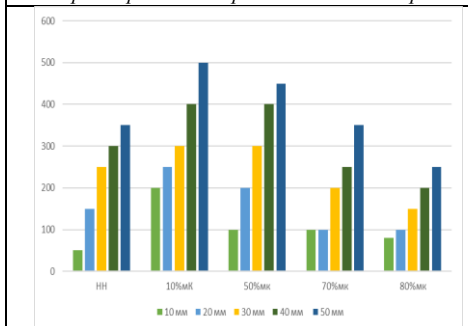
3. *Мікротвердість по Брінеллю після витримки в кислоті (HNO_3).* В загальному мікротвердість суттєво зменшилася, особливо це помітно в ненаповненого, для 70 % МК та 80 % МК, – де їхні показники погіршилися майже вдвічі (відносно необроблених зразків, рис. 1.3).



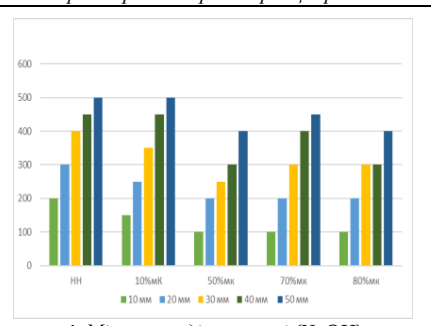
1. Мікротвердість по Брінеллю звичайних зразків



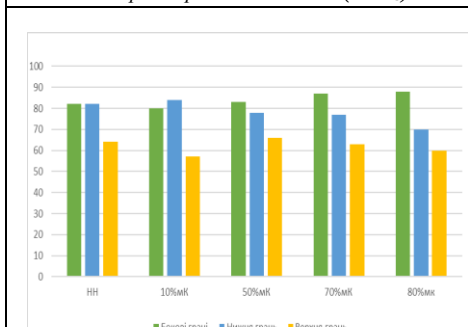
2. Мікротвердість при t-обробці при 120 °C



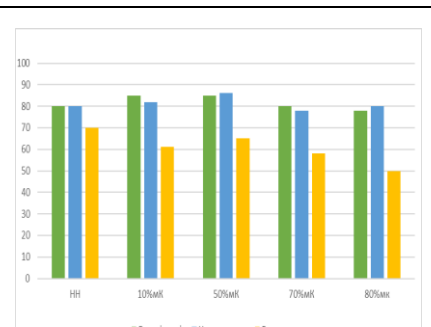
3. Мікротвердість в кислоті (HNO_3)



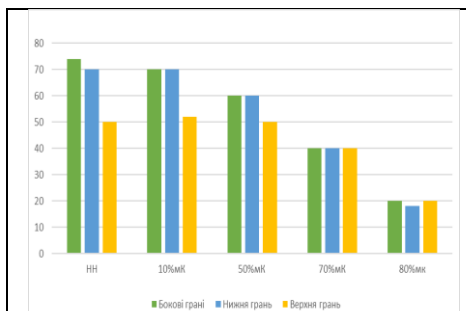
4. Мікротвердість в лузі ($NaOH$)



5. Мікротвердість по Шору для звичайних зразків



6. Мікротвердість по Шору в лузі



7. Мікротвердість по Шору в кислоті



А

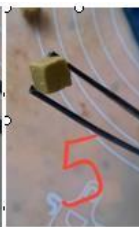


Б

8. Мікротвердоміри



9. Вигляд композицій з малим та високим вмістом кварцу



10. Вигляд зразків композитів (після витримки в HNO_3)

Рис. 1. Діаграми мікротвердості при різних умовах (1–7) та вигляд приладів (8) та зразків (9–10)

Однак показники 50 % МК отримали лише незначне послаблення, а 10 % МК навіть підвищив свою мікротвердість в кислоті на 100 Н, що свідчить про його резистентність до нітратної кислоти. З цього випливає, що наповнення 10 % МК та в меншій мірі 50 % МК надає кислотостійкості – і його можна використовувати в азотній кислоті без побоювань втрати мікротвердості.

4. Мікротвердість по Брінеллю після витримки в розчині лугу (NaOH). З цього випливає, що НН та низько наповнений 10 % МК можна використовувати в натрій гідроксиді без побоювань втрати ним мікротвердості, яка після витримки майже не зменшилася, іноді навіть посилили свої проміжні результати (рис. 1.4). Особливо значних послаблень набули зразки з 50 % МК та 80 % МК, менше постраждав від дії лужного розчину 70 % МК майже не відрізняється від стандартної (зразка не витриманого в лузі)

мікротвердості. Це говорить про постійну зміну структури зразка при підвищенні вмісту кварцу.

5. *Мікротвердість по Брінеллю після витримки у воді.* В загальному мікротвердість не зазнала суттєвих змін (рис. 1.5). Значного послаблення набув лише НН зразок, також 70 % МК дещо послабився (до рівня інших композитів). Всі інші зразки не змінилися взагалі. Ймовірною причиною цього може бути стійкість мікрокварцу до води, що й зумовлює відсутність змін. В свою чергу 70 % МК зменшив показники через можливі пористості в своїй будові.

6. *Мікротвердість по Шору для необроблених зразків.* Мікротвердість за Шором – це метод визначення твердості матеріалів шляхом вдавлювання спеціальної голки під дією пружини, використовуючи спеціальний прилад DUROMETER (ASTM 2240-D, рис. 1. 8Б). Мікротвердість в дослідженні вимірювалася з різних граней правильного куба довжиною ребра 1 см, й бралася середнє арифметичне значення з вимірів. В подальшому дослідженні значення мікротвердості по Шору буде зображено, як середнє значення. Згідно результатів, мікротвердість змінюється залежно як від ступеню наповнення так і від грані зразка (верхньої, бокової, нижньої). Наприклад, мікротвердість бокових граней кубиків, взятих для дослідів, більша ніж у інших граней. В той же час верхня грань куба має значно нижчі результати ніж інші грані. Ймовірною причиною цього може бути нерівність та пористість верхньої поверхні. При 10 % МК, маємо в цілому незначне зниження показника, за виключенням дна зразка, яке стає твердішим, ймовірно внаслідок часткового осідання мікрокварцу на дно (рис. 1.5).

7. *Мікротвердість по Шору після витримки в лужному (NaOH) розчині.* Результати дослідження показані на діаграмі 1.6. З результатів, які ми отримали, вимірюючи мікротвердість по Шору можна побачити, що мікротвердість є чутливою до наповнення. При наповненнях менше та 50 мас % посилилася мікротвердість бокових і нижніх граней кубиків, тоді як при вищих наповненнях вона мало змінюється. При всіх наповненнях маємо послаблення мікротвердості верхніх граней. Ймовірними причинами цього може бути нерівність та пористість поверхні верхньої грані, та вихід на неї з об'єму домішок та недоотверділих фрагментів.

8. *Мікротвердість по Шору в кислоті (HNO₃).* З результатів, які ми отримали, випливає, що витримка в кислоті знижує показник для всіх зразків. Це стає все помітнішим зі зростом наповнення, і при 80 мас % мікротвердість стає в 2,5–3,5 рази нижчою за показник без наповнювача (рис. 1.7). Вимірюючи мікротвердість після витримки в кислоті було помічено, що після кислоти розрив між найбільшим та найменшим значенням при обрахунку середньоарифметичного майже зник. Також нами було помічено, що зі збільшенням концентрації мікрокварцу зменшується диспропорція значень міцності бокових, нижніх та верхніх граней й у той же час і загальне послаблення мікротвердості. Це спостереження відмінностей говорить про уніфікацію кислотою структури зразка.

9. *Мікротвердість по Шору після витримки в воді.* З результатів, які ми отримали, вимірюючи мікротвердість по Шору можна побачити, що в загальному мікротвердість не змінилася. Зразки з 10 % МК та 50 % МК майже не мають змін відносно НН – тоді як 70 % МК та 80 % МК посилити всі свої показники у воді. Однак в усіх випадках маємо зниження показника на верхній грані (очевидно внаслідок). окрім верхньої грані. Ймовірною причиною цього може бути посилення її пористості, нерівності та неоднорідності після наповнення.

Висновки. У результаті проведеного дослідження було встановлено, що мікротвердість стандартних зразків з 70 % МК виросла на 20 %. Після прогрівання зразків

ненаповненого мікрокварцу (НН) та з 10 % МК послабили свою мікротвердість на 20 %, тоді як інші зразки підвищили свої показники від 10 % до 70 %. Усі зразки зберегли свою мікротвердість у воді на відміну від НН, причиною цього ймовірно є стійкість мікрокварцу у воді. Щодо адгезії можна рекомендувати 10 % МК з середнім показником 172 кгс на 3 см². Зі збільшенням кількості мікрокварцу посилюється вогнестійкість композитів до повної вогнестійкості. У лузі та кислоті зі збільшенням концентрації мікрокварцу послаблюється його мікротвердість. Також була виявлена стійкість зразків до води та лугу. Можна рекомендувати епоси-кварцові композити для створення водо-, луго- та кислотостійких, вогнестійких зміцнених матеріалів з покращеною адгезією для сталевих поверхонь.

Проведено дослідження епоксидних композитів з різною концентрацією мікрокварцу – від порівняно низьких (10 мас %) до максимально можливих (80 мас %). Показано, що наповнення приводить до суттєвого збільшення (в 1,5–2 рази) об'єму композиції, яка стає більш в'язкою, але в цілому зберігає характер отвердіння та формування. Після отвердіння, утворюються каменеподібні композити з високими механічними показниками, які однак в ряді випадків є дещо нижчими за властивості ненаповненого полімеру. Мікротвердість по Брінеллю після наповнення стандартних зразків (без додатково обробки) після наповнення не знижується, а в околі 70 мас % сягає максимуму, за будь-яких ступенів занурення пуансона (від 10 до 50 мм). Термообробка при 120 °С посилює ефект наповнення до монотонно зростаючої залежності від концентрації (відповідно максимальна мікротвердість при 80 мас %). Разом з тим, витримка в кислоті суттєво зменшує показник, особливо ненаповнених та високонаповнених 70 % МК та 80 % МК (погіршилися майже вдвічі). Однак оптимальне наповнення 10 та 50 мас % здатне дуже позитивно впливати на цей показник. Після витримки у воді мікротвердість ненаповненого зразка спадає, натомість всі наповнені зразки демонструють однаковий результат стійкості до води. Навпаки, після витримки в лужному розчині мікротвердість спадає з ростом наповнення. Мікротвердість по Шору також демонструє залежність від ступеню наповнення та обробки, а також від грані зразка (верхня грань куба має значно нижчі результати ніж інші – ймовірно через усадку, пористість та вихід низькомолекулярних фрагментів). Стандартні зразки очікувано дають загалом ріст показника з ростом наповнення. Після витримки в азотній кислоті тенденція навпаки, обернена (зменшення з ростом наповнення). Витримка в лужному середовищі мало впливає, однак дещо зменшує показник при максимальних вмісті 70–80 мас %. Витримка у воді практично не впливає на показник для всіх зразків.

Список використаних джерел

1. G. Buccella, A. Peressut, L. Brambilla, G. Dotelli // Experimental characterization of epoxy/quartz composite material exposed to PDs Polymer Degradation and Stability // V. 228, 2024, p. 110901. <https://doi.org/10.1016/j.polymdegradstab.2024.110901>
<https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0141391024002453>
2. O. de Oliveira, G. Bobrovnichii, L. de Oliveira, R. da Rocha Paranhos, R. Aigueira, M. Filgueira // Epoxy–quartz based composites for use in polishing crowns of ornamental rocks (2009) *Materials Characterization*, 2009, Volume 60, Issue 8, Pages 869–874, ISSN 1044-5803, <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1044580309000758>
3. Goyanes, S. N., Marconi J. D., König P. G., Martin M. D., Mondragon I. (2000) Dynamic properties of epoxy composite filled with quartz powder // J. Alloys Compd. 2000, 310, pp. 374–377. <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S092583880000952X>
4. Sagi-Mana, D., Narkis M., Siegmann A., Joseph, R., Dodiuk H. (1998) The effect of marine environment on a vinyl ester resin and its highly filled particulate quartz composites. J. Appl. Polym. Sci.

1998, 69, pp. 2229–2234. [https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/\(SICI\)1097-4628\(19980912\)69:11%3C2229::AID-APP15%3E3.0.CO;2-U](https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/(SICI)1097-4628(19980912)69:11%3C2229::AID-APP15%3E3.0.CO;2-U)

5. Das, S.K., Nath, M.R., Das, R.C., Mondal M., Bhowmik S., Asian J. Quartz Reinforced Unsaturated Polyester Resin Composites: Preparation and Characterization. (2021) Appl. Chem. Res. 2021, 10, 14–25. - <https://www.researchgate.net/publication/356144549>

6. D. Catherall. What Is Epoxy Quartz Flooring and Why Choose It? \ DC Flooring <https://www.dcflooring.co.uk/what-is-epoxy-quartz-flooring/>

7. Epoxycomposites With Sand Of Different Geochemical Nature As Promising Resistant Functional Materials For Construction And Repair (2025) D. Starokadomsky, V. Furdychko, R. Lavrik, M. Reshetnyk \ *Exploratory Materials Science Research* –V. 7(2) – p. 111-121. - DOI: 10.47204/EMSR.7.2.2025.111-121.

THE PRESENCE OF MAGNESIUM ATOMS IN ALLOYS REDUCES THE ACTIVITY OF HYDROGEN ATOMS

¹Alexander Savenko, ¹Lyudmila Kopylova, ¹Tatyana Shaposhnikova, ¹Nina Anikina, ¹Olga Krivushchenko, ^{1,2}Natalia Gavriluk, ¹Anatoly Zolotarenko, ²Alexander Zolotarenko, ⁴Yuri Zhirko, ^{1,4}Dmitry Shchur, ³Maratbek Gabdullin

¹Frantsevich Institute for Problems of Materials Science of NASU,
3 Omeliana Pritsaka Str., Kyiv, 03142, Ukraine,

²Chuiko Institute of Surface Chemistry of NASU, 17 Oleh Mudrak Str., Kiev, 03164, Ukraine

³Kazakh-British Technical University (KBUTU) 71, Al-Farabi Str., Almaty, 050040, Kazakhstan

⁴Institute of Applied Physics of the N.A.S. of Ukraine, 58 Petropavlivska Str.,
UA-40000 Sumy, Ukraine. e-mail: n_afanasiyivna@ukr.net

Lanthanum-nickel alloys attract the attention of scientists in connection with the possibility of their use as accumulating and storage devices of hydrogen as an energy source. Much attention was paid to the study of LaNi₅, LaNi₇ alloys and multi-component alloys created on their basis. In the latter, lanthanum atoms are partially replaced by atoms of rare earth elements R = Er, Gd, Nd, Pr, Sm, Y, and nickel atoms -by metal and nonmetal atoms M = Al, B, Co, Cu, Fe, Mg, Mn, Si, Sn. In our works, La_{1-x}RxNi₅-YMY alloys [1–2] were studied, the solubility of hydrogen in them was calculated.

Recently, intensive studies of lanthanum-magnesium-nickel alloys have been carried out. It has been established that magnesium improves the kinetic characteristics of alloys.

In [3], the structure and electrochemical properties of La_{2-x}MgxNi₇ (x = 0.3–0.6) alloys were systematically studied. The formation of three phases in the system was established:

1) La_{2-x}MgxNi₇,

2) LaNi₅,

3) La_{1-x}MgxNi₃ depending on the concentration x of magnesium. In this case, for different values of x, a mixture of phases is formed from two alloys: at x = 0.3–0.5, the samples are a mixture of alloys La_{2-x}MgxNi₇ and LaNi₅, at x = 0.6 – a mixture of the first alloy with La_{1-x}MgxNi₃. The content of the first alloy in the mixture of phases is set as follows: x = 81.5; 93.7; 96.8; 60.7 wt. %, respectively, at x = 0.3; 0.4; 0.5; 0.6.

In this work a statistical theory of hydrogen solubility in lanthanum-magnesium-nickel alloys with structures L22, D2d, L6O has been developed.

The free energies of alloys are calculated by the method of average energies under the assumption of the crystal lattices geometric ideality and the approximation of hydrogen atoms pair interaction with the nearest metal atoms. From the conditions of thermodynamic

equilibrium, formulas are obtained that determine P–T–c diagrams of hydrogen solubility in alloys.

Hydrogen solubility isotherms corresponding to different values of the hydrogen atoms activity in the alloys under consideration have been studied. It is shown that with a decrease of the hydrogen atoms activity coefficient, a horizontal section, a plateau, appears and lengthens on the solubility isotherms. According to our assumption, the admixture of magnesium to the lanthanum-nickel alloy reduces the activity of hydrogen atoms, since, according to the experimental data, the appearance and elongation of the plateau occurs with an increase of the magnesium concentration in the mixtures of the alloy phases under study.

The hysteresis phenomena are studied taking volume effects into account. The estimation of hysteresis coefficients for different values of the theory parameters (values α , D) and concentration x of magnesium has been carried out. It is substantiated that the coefficient determining the dependence of the atoms interaction energies on pressure should slightly affect the course of hydrogen solubility isotherms, i.e. that the noted dependence should be weakly manifested. It is shown that with a decrease of the hydrogen atoms activity (coefficient D), the hysteresis coefficient decreases, which is consistent with experimental data under the assumption that the presence of magnesium reduces the activity of hydrogen atoms. An increase of the magnesium concentration leads to the fact that the curves of hydrogen solubility isotherms should be realized at lower pressures (the curves along the y-axis are lower), while the length of the plateau slightly increases. Both of them are also consistent with the experimental data.

Acknowledgment

The study was financially supported by the National Academy of Sciences of Ukraine within the framework of research programs in priority directions in 2023–2025.

References

1. D. V. Schur, et al. Features of hydrogen storage in a compact state. I. Hydrogen atoms in crystalline solids, LAMBERT Academic Publishing 632 c, (2025).
2. D. V. Schur, et al. J. Alloys and Compounds. 2002, V. 330-332, P. 81-84. (2002).
3. Сторіжко В. Ю., Жирко Ю. І., Щур Д. В., Гаврилюк Н. А., Золотаренко О. Д., Золотаренко А. Д. Особливості зберігання водню в твердому тілі та фазові перетворення в металогідридах з різною кристалічною структурою. Київ: Наукова думка, 2024. 524 с.

EQUILIBRIUM DISTRIBUTION OF INTERSTITIAL ATOMS IN AN ORDERED ALLOY

^{1,2}Natalia Gavrilyuk, ¹Alexander Savenko, ¹Lyudmila Kopylova, ¹Tatyana Shaposhnikova,

^{1,2}Vasilii Mashira, ¹Nina Anikina, ¹Olga Krivushchenko, ¹Anatoly Zolotareno,

²Alexander Zolotareno, ⁴Yuri Zhirko ^{1,4}Dmitry Shchur, ³Maratbek Gabdullin

¹Frantsevich Institute for Problems of Materials Science of NASU,

3 Omeliana Pritsaka Str., Kyiv, 03142, Ukraine,

²Chuiko Institute of Surface Chemistry of NASU, 17 Oleh Mudrak Str., Kiev, 03164, Ukraine

³Kazakh-British Technical University (KBUTU) 71, Al-Farabi Str., Almaty, 050040, Kazakhstan

⁴Institute of Applied Physics of the N.A.S. of Ukraine, 58 Petropavlivska Str.,

UA-40000 Sumy, Ukraine. e-mail: n_afanasiiyivna@ukr.net

Small impurity atoms are distributed in the crystal over interstices. In the presence of free surfaces, impurity atoms are located in a certain way both over the volume of the sample and on

its surface. Depending on the energy of the implanted atoms in certain positions, on their number, as well as on the temperature and pressure, it may be energetically favorable to place impurity atoms only on the surface or only in the bulk. A change in the volume of a crystal, for example, under the influence of an external all-round pressure, should affect the character of the interstitial atoms distribution [1]. Knowledge of the interstitial atoms redistribution processes over the interstices of a crystal and their causes can allow purposefully shaping these processes in order to obtain certain physical characteristics of materials. The kinetics of the interstitial atoms redistribution over interstices in the volume was studied for metals and ordering alloys of various structures [1–2].

In this work discusses the theoretical study of the interstitial H atoms equilibrium distribution on the free surface for the faces (111), (011), (001) BCC crystal, as well as thermally activated redistribution of interstitial H atoms along the volume and surface faces (111) internodes (interstices).

Comparing formulas for the equilibrium distribution of C atoms in different positions, one can find out the effect of the surface layer texture of a metal or alloy, its composition (including taking into account the effect of surface segregation) on the solubility of the interstitial impurity and predetermine the latter for various structures of the free face of the crystal and predict which crystal faces must be free in order to obtain the required solubility of the interstitial impurity, which contributes to the formation of certain physical properties of the material.

In conclusion, it should be noted that the refinement of the theory can be carried out in the direction of taking into account the relaxation of the surface, the presence of special surface states, the correlation in the filling nodes and interstices of the lattice by atoms, changes in interatomic distances, geometric distortions of the lattice, atomic ordering both at sites (nodes) and at interstices, as well as taking into account volume effects due to embedded (interstitial) C atoms, dimensional factor of atoms A and B, the free surface of the crystal.

Studied: the energies and concentrations of the interstitial atoms; Kinetic equations; Equilibrium distribution of interstitial atoms in metal; Equilibrium distribution of interstitial atoms in an ordered alloy; Study of the interstitial atoms redistribution kinetics in metal films; Kinetics of the Interstitial Atoms Redistribution in alloy AB Films. Process relaxation time; Comparison of calculation formulas with experimental data; Interstitial Atoms in Octa- and Tetrahedral Interstices of BCC Crystals with the Free Surface of the (001), (011), and (111) Facets; Equilibrium distribution of interstitial atoms in a crystal with a face surface (001); Influence of the crystal thickness on the interstitial atoms distribution. Surface segregation effect; Interstitial atoms in a crystal with a (011) face surface. Relaxation time; Interstitial atoms in a crystal with a face surface (111); in a crystal with a (011) face surface. Relaxation time; Interstitial atoms in a crystal with a face surface (111).

Acknowledgment

The study was financially supported by the National Academy of Sciences of Ukraine within the framework of research programs in priority directions in 2023–2025.

References

1. D. V. Schur, et al. Features of hydrogen storage in a compact state. I. Hydrogen atoms in crystalline solids, LAMBERT Academic Publishing 632 c, (2025).
2. D. V. Schur, et al. J. Alloys and Compounds. 2002, V. 330-332, P. 81-84. (2002).
3. Сторіжко В. Ю., Жирко Ю. І., Щур Д. В., Гаврилюк Н. А., Золотаренко О. Д., Золотаренко А. Д. Особливості зберігання водню в твердому тілі та фазові перетворення в металогідрідах з різною кристалічною структурою. Київ: Наукова думка, 2024. 524 с.

DEVELOPMENT OF THE THEORY OF INTERSTITIAL IMPURITY SOLUBILITY

¹Olga Krivushchenko, ¹Alexander Savenko, ¹Lyudmila Kopylova,

¹Tatyana Shaposhnikova, ¹Nina Anikina, ^{1,2}Natalia Gavriluk, ^{1,2}Taisiya Korochkova,

¹Anatoly Zolotarenko, ²Alexander Zolotarenko, ⁴Yuri Zhirko ^{1,4}Dmitry Shchur,

³Maratbek Gabdullin

¹Frantsevich Institute for Problems of Materials Science of NASU,

3 Omeliana Pritsaka Str., Kyiv, 03142, Ukraine,

²Chuiko Institute of Surface Chemistry of NASU, 17 Oleh Mudrak Str., Kiev, 03164, Ukraine

³Kazakh-British Technical University (KBUT) 71, Al-Farabi Str., Almaty, 050040, Kazakhstan

⁴Institute of Applied Physics of the N.A.S. of Ukraine, 58 Petropavlivska Str.,

UA-40000 Sumy, Ukraine.

e-mail: n_afanasiyivna@ukr.net

Interest in the study of metal-hydrogen systems continues to grow due to their wide use in many technological processes in hydrogen energy. It is known that hydrides are a source of pure hydrogen, which is necessary both for various technologies and for research purposes. The reserves of hydrogen in the bound state are almost limitless. The multicomponent nature of hydride systems makes it possible to create accumulators with a controlled hydrogen content. Systematic study of hydride systems may lead to new practical applications [1–2].

Promising in this direction are lanthanum-nickel systems created on the basis of the LaNi_5 alloy, in which lanthanum atoms can be partially replaced by atoms of rare earth metals: $R = \text{Nd}$, Pr , Sm , Er , Y , Gd , and nickel atoms can be replaced by atoms $\text{Me} = \text{Al}$, Cu , Fe , Mn , Si . Such substitutions can increase the stability of the structure, increase water absorption, and reduce the cost of the material. Examples of such systems are hydrides $\text{LaNi}_4\text{AlH}_5$, $\text{La}_2\text{Ni}_9\text{AlH}_{10}$, $\text{LaNi}_{4.5}\text{Co}_{0.5}\text{H}_{8.8}$, $\text{LaNi}_3\text{Co}_2\text{H}_5$, $\text{La}_{0.8}\text{Er}_{0.2}\text{Ni}_5\text{H}_6$, $\text{La}_{0.8}\text{Co}_{0.2}\text{Ni}_5\text{H}_6$, in which the atomic concentration of hydrogen is comparable to the concentration of metal atoms, exceeds it.

The developed theory of hydrogen solubility in lanthanum-nickel storage alloys with the D_{2d} structure made it possible to substantiate the high limiting solubility of hydrogen, which manifests itself experimentally, to establish the effect of the impurity R or Me in the LaNi_5 alloy, to predict the positions of hydrogen atoms, to explain the nature of possible functional dependencies of hydrogen solubility, to establish the reasons for these dependencies.

Such knowledge can make it possible to regulate the content of hydrogen in systems, accumulating or extracting it as necessary. The study of metals and alloys of arbitrary structure and any composition made it possible to establish a similar form of various gases solubility isopleths, as for the solubility of hydrogen in lanthanum-nickel storage alloys.

The obtained formulas, in the presence of experimental graphs of the hydrogen solubility and other interstitial impurities, can make it possible to estimate the physical parameters of the systems under study, such as the energies of interatomic interaction, the energy coefficient α , and the activity coefficient D .

Knowledge of these parameters from independent experiments for each specific system of the structures under consideration can make it possible, using the obtained formulas, to predetermine the functional dependences of the hydrogen, nitrogen, and oxygen solubility in them.

We also note that further development of the interstitial impurity solubility theory can be carried out in the direction of taking into account the ordering of impurity atoms when they are placed in interstices of different types, which leads to the appearance of discontinuities and jumps in the functional dependences of solubility during phase transitions of the first order,

which were observed, for example, on isosteres adsorption of hydrogen on ruthenium, taking into account the possibility of the crystal lattice changing type, transition to FCC or BCC, which can be initiated by an excess of, for example, hydrogen, taking into account the interactions of impurity atoms with each other, which can cause jumps, for example, in the solubility of hydrogen, taking into account the possibility of complexes formation from impurity atoms at high concentrations, which should change the solubility in the direction of its increase, and also taking into account the mutual influence of the interstitial impurities solubilities.

Acknowledgment

The study was financially supported by the National Academy of Sciences of Ukraine within the framework of research programs in priority directions in 2023–2025.

References

1. D. V. Schur, et al. Features of hydrogen storage in a compact state. I. Hydrogen atoms in crystalline solids, LAMBERT Academic Publishing 632 c, (2025).
2. D. V. Schur, et al. J. Alloys and Compounds. 2002, V. 330-332, P. 81-84. (2002).
3. Сторіжко В. Ю., Жирко Ю. І., Щур Д. В., Гаврилюк Н. А., Золотаренко О. Д., Золотаренко А. Д. Особливості зберігання водню в твердому тілі та фазові перетворення в металогідрідах з різною кристалічною структурою. Київ: Наукова думка, 2024. 524 с.

DEPENDENCE OF HYDROGEN CAPACITY ON THE AMOUNT OF INITIAL COMPONENTS IN CRYSTALS

^{1,2}Anatoly Zolotarenko, ¹Alexander Savenko, ¹Lyudmila Kopylova, ¹Tatyana Shaposhnikova, ¹Nina Anikina, ¹Olga Krivushchenko, ^{1,2}Natalia Gavrilyuk, ^{1,2}Alexander Zolotarenko, ⁴Yuri Zhirko, ^{1,4}Dmitry Shchur, ³Maratbek Gabdullin

¹Frantsevich Institute for Problems of Materials Science of NASU, 3 Omeliana Pritsaka Str., Kyiv, 03142, Ukraine,

²Chuiko Institute of Surface Chemistry of NASU, 17 Oleh Mudrak Str., Kiev, 03164, Ukraine

³Kazakh-British Technical University (KBUTU) 71, Al-Farabi Str., Almaty, 050040, Kazakhstan

⁴Institute of Applied Physics of the N.A.S. of Ukraine, 58 Petropavlivska Str.,

UA-40000 Sumy, Ukraine.

e-mail: n_afanasiiyivna@ukr.net

Recently, alloys with magnesium have attracted the attention of scientists due to the possibility of their use as accumulators and storage devices of hydrogen, an attractive, promising, perspective, environmentally friendly source of energy. Advances in the study of magnesium hydrides have led to significant advances in hydride materials science. Such materials have great advantages in comparison with other hydrogen accumulators. It is an environmentally friendly material that slightly pollutes the environment. Its highly accumulative capacity, its lightness, the presence of raw materials huge reserves (2.3% in the earth's crust and 1.3% in the water of the oceans), low energy consumption of production, short duration of the sample preparation process, simplicity of manufacturing equipment, reversibility of hydrogenation-dehydrogenation processes with minimal hysteresis effect attract the attention of scientists.

MgH₂ hydride is being intensively studied, the addition of iron and nickel to which gives new practically important properties. Iron-magnesium and nickel-magnesium hydrides

Mg₂FeH₆, Mg₂NiH₄ have been studied especially intensively in recent years [1–2], their hydrogen storage capacity is 5.5 wt. % and 3.6 wt. %, respectively.

It is impossible to obtain such materials by metallurgical melting, since the melting points of the starting materials are very different: for magnesium, iron and nickel, they are respectively 923 K, 1707 K and 1726 K. Such hydrides are obtained using powder sintering technology: first, mixture of the initial components Mg + Fe, MgH₂ + Fe or Mg + Ni are crushed to micron size particles, then the powder is stirred to a homogeneous mixture, then the mixture is pressed and heated in a hydrogen environment [2]. A hydrogenation reaction takes place.

Depending on the amount of initial components, both Mg₂FeH₆ or Mg₂NiH₄ crystals, and magnesium hydride MgH₂ and iron residue can be formed. In general, all reactions are highly exothermic (except for weakly endothermic reactions of Mg₂Ni alloy and MgH₂ hydride formation).

The developed statistical theory of sorption phenomena in magnesium, iron-magnesium and nickel-magnesium hydrides made it possible to explain and substantiate the experimentally observed absorption-desorption processes in these materials. The free energies of the phases are calculated, the equations of their thermodynamically equilibrium states are obtained, which determine the P-T-c diagrams. The temperature dependence of the desorbed hydrogen amount was calculated, and the maximum desorption temperature T_O was estimated. A state diagram of the temperature T_O dependence on the hydrogen content is constructed, which determines the temperature and concentration regions of the hydrides realization and their decomposition into components of metals and free hydrogen.

The isopleths of hydrogen solubility in the materials are constructed and their parameters, which determine the level and slope of the isopleths, are estimated. The results obtained correspond to the experimental data available in the literature.

Isotherms of hydrogen solubility in the crystals are calculated and constructed. The possibility of realizing the hysteresis effect is revealed. It is established that the hysteresis loop shortens, narrows and disappears with increasing temperature. In the case of different hydrides mixture, as well as the occurring of chemical reactions, the appearance of bends and jumps in the hysteresis loop are possible. This phenomenon is confirmed experimentally. The effect of impurity atoms occupying the positions of matrix atoms on the change in the course of absorption-desorption isotherms is estimated. All functional regularities of sorption phenomena in the studied hydrides are compared with experimental literature data. Their qualitative correspondence is observed.

Acknowledgment

The study was financially supported by the National Academy of Sciences of Ukraine within the framework of research programs in priority directions in 2023–2025.

References

1. D. V. Schur, et al. Features of hydrogen storage in a compact state. I. Hydrogen atoms in crystalline solids, LAMBERT Academic Publishing 632 c, (2025).
2. D. V. Schur, et al. J. Alloys and Compounds. 2002, V. 330-332, P. 81-84. (2002).
3. Сторіжко В. Ю., Жирко Ю. І., Щур Д. В., Гаврилюк Н. А., Золотаренко О. Д., Золотаренко А. Д. Особливості зберігання водню в твердому тілі та фазові перетворення в металогідрідах з різною кристалічною структурою. Київ: Наукова думка, 2024. 524 с.

A THEORETICAL STUDY OF ATOMIC ORDERING IN A₃B BINARY ALLOYS

^{1,2}Alexander Zolotarenko, ^{1,2}Anatoly Zolotarenko, ¹Alexander Savenko,

¹Lyudmila Kopylova, ¹Tatyana Shaposhnikova, ¹Nina Anikina, ¹Olga Krivushchenko,

^{1,2}Natalia Gavriluk, ⁴Yuri Zhirko, ^{1,4}Dmitry Shchur, ³Maratbek Gabdullin

¹Frantsevich Institute for Problems of Materials Science of NASU, 3 Omeliana Pritsaka Str.,
Kyiv, 03142, Ukraine,

²Chuiko Institute of Surface Chemistry of NASU, 17 Oleh Mudrak Str., Kiev, 03164, Ukraine

³Kazakh-British Technical University (KBTU) 71, Al-Farabi Str., Almaty, 050040, Kazakhstan

⁴Institute of Applied Physics of the N.A.S. of Ukraine, 58 Petropavlivska Str.,

UA-40000 Sumy, Ukraine

e-mail: n_afanasiiyivna@ukr.net

A theoretical study of atomic ordering in A₃B binary alloys of the A15 structure with an admixture of the third component C was performed. The free energy of the system was calculated as a function of the alloy composition, temperature, atomic order parameter, and energy constants of pairwise interatomic interaction. An equilibrium equation is found that determines the long-range order degree as a function of the alloy composition and temperature. The features of the atomic ordering process for alloys of the structure under consideration are elucidated, it is established that a first-order phase transition of the order-order type with a jump-like change in the long-range order degree is possible in the system, and a criterion for such a transition is established. It is substantiated that with an increase of the third component C concentration, the phase transformation temperature should decrease, and the phase transition may disappear at a certain impurity concentration C. This circumstance indirectly corresponds to the experimental data on the study of phase transformation temperatures in the Nb₃SnH_x system. The solubility of impurity C in the A₃B alloy was calculated. The calculation was performed both by the average energy method and by the more consistent configuration method. The dependence of the component C solubility in the alloy on the concentrations of components A, B, temperature T and degree of long-range order is determined. It has been established that the concentration and temperature dependences of solubility can be extreme: the dependence of solubility on the composition of the alloy can have a maximum, the temperature dependence of solubility can have a minimum. Criteria are obtained for the extreme dependence of impurity solubility on alloy composition and temperature, which turned out to be different from those for alloys of other structures. The dependence of solubility on the long-range order degree turned out to be monotonic, and the limits of change in the parameters characterizing the atomic order were established, at which atomic ordering increases and decreases the solubility of the C component. An order-order type phase transformation should cause an abrupt change in the solubility of the impurity C.

Graphs of the long-range order degree as a function of temperature for different concentrations of impurity C, temperature and concentration dependences of the impurity C solubility in a disordered A₃B alloy for various values of the energy parameters, as well as graphs of the relative solubility dependence on parameters characterizing the atomic order are plotted.

Acknowledgment

The study was financially supported by the National Academy of Sciences of Ukraine within the framework of research programs in priority directions in 2023–2025.

СЕКЦІЯ 2. ФУНДАМЕНТАЛЬНА, ОРГАНІЧНА, НЕОРГАНІЧНА ТА ФІЗИЧНА ХІМІЯ

CATALYTIC PROPERTIES OF HIERARCHICAL SN-CONTAINING ZEOLITES IN THE PROCESS OF PRODUCING METHYL LACTATE FROM GLUCOSE

Elina Romanenko¹, Mykhailo Kurmach¹, Oleh Lytiuha², Serhii Poliakov³, Pavlo
Yaremov¹, Oleksiy Shvets¹

¹*L.V. Pisarzhevskii Institute of Physical Chemistry of the NAS of Ukraine,
31 Nauki Ave., Kyiv, 03028, Ukraine*

²*Farmak Ltd, 63 Kyrylivska str., Kyiv, 04080, Ukraine*

³*Enamine LTD, 78 Winston Churchill str., Kyiv, 03028, Ukraine
e-mail: eli.rom2020@gmail.com*

Lactic acid and its derivatives, particularly methyl lactates, are widely used in the food, pharmaceutical, cosmetic, and chemical industries as solvents, precursors for biodegradable plastics (including for 3D printing), propylene glycol, and solvents. Catalytic conversion of biomass into lactic acid or alkyl lactates is considered a promising approach for producing such materials due to its high reaction rate, scalability, and greater efficiency.

It is known from the literature that zeolites of the Sn-BEA type (which predominantly possess Lewis acid sites) are capable of catalyzing the conversion of carbohydrates into methyl lactate in methanol at 160 °C. However, the yields of the target products remain relatively low (up to 50 %). Hierarchical Sn-containing zeolites of the BEA structural type, synthesized using Gemini-type surfactants as structure-directing agents (the "direct" method) [1], are promising catalysts for this process due to their well-developed external surface area. Nevertheless, a drawback of this method is its relatively high cost, stemming from the expensive synthesis of the template and its high consumption (approximately 2 g of template per 0.5 g of finished zeolite).

To address this challenge, the present work proposes an alternative strategy based on a dual-template approach for the synthesis of mesoporous (hierarchical) zeolites, using less expensive ionic and non-ionic surfactants as mesopore-formers and tetraethylammonium hydroxide as the structure-directing agent. The catalytic activity of these materials was compared with materials of a similar zeolitic structure synthesized using so-called Gemini surfactants as the template.

The mesopore-formers employed in this work can be divided into two categories: non-ionic and cationic. Sodium stearate and a di-nitrogen Gemini surfactant were used as cationic surfactants, while polyvinyl alcohol (PVA) and polymers based on ethylene glycol and propylene glycol (polyethylene glycol (PEG), Pluronic P123®, Pluronic F127®, Triton X-100®, and Brij® 56) were used as non-ionic surfactants. In addition, carboxymethylcellulose- and hydroxymethylcellulose-based materials were tested as potential mesopore-formers.

Based on the results obtained, it was shown that under identical synthesis conditions at a molar ratio of Si/mesopore-former = 1/30 (molar ratios: Si/Sn = 75, Si/F = 2, F/TEAOH = 1.1, Si/H₂O = 7.5), the use of polyvinyl alcohol and polyethylene glycol yielded zeolites with high specific surface areas (up to 300 m²/g) and mesopore volumes (up to 1 cm³/g), whereas the addition of the remaining substances resulted in microporous zeolites. Unlike typical hierarchical zeolites with a broad mesopore size distribution (up to 20 nm), PVA or PEG produced materials with a uniform mesopore size distribution in the range of 30–40 nm, attributed to the larger molecular size of the polymers. For samples at Si/Sn = 100 with PVA, maximum specific surface area and mesopore volume were found after 14 days of hydrothermal treatment, while extending to 26 days led to microporous zeolite formation.

The synthesized materials were evaluated in the conversion of glucose to methyl lactate (Fig. 1). All samples exhibited high glucose conversion approaching 100%; however, selectivity varied considerably. Hierarchical samples (Fig. 1b) and samples with a well-developed external surface area showed high selectivity toward methyl lactate, whereas non-hierarchical samples displayed selectivity of 30–40 %.

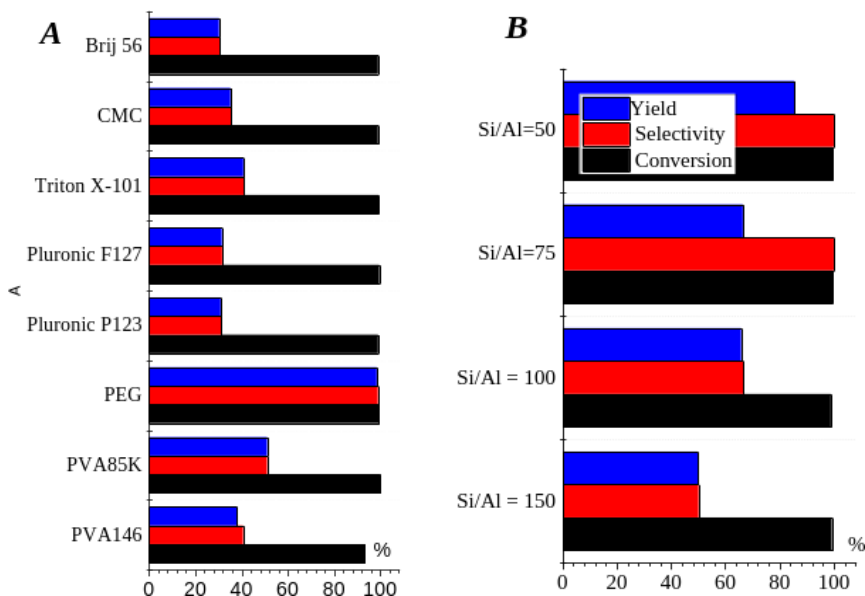


Fig. 1. Catalytic performance of Sn-BEA zeolites synthesized using various mesoporegens (A) and Gemini surfactants (B) in the conversion of glucose to methyl lactate

References

1. Choi M., Na K., Kim J., Sakamoto Y., Terasaki O., Ryoo R. *Nature*, 2009, 461 (7261), 246–249.

DETERMINATION OF THE ZERO CHARGE POINT ON THE SURFACE OF TI-, SN-, ZR-CONTAINING ZEOLITES BY THE POTENTIOMETRIC MASS TITRATION METHOD

Elina Romanenko, Mykhailo Kurmach, Oleksiy Shvets

L.V. Pisarzhevskii Institute of Physical Chemistry of the NAS of Ukraine, 31 Nauki Ave., Kyiv, 03028, Ukraine. e-mail: eli.rom2020@gmail.com

Ti-, Sn-, and Zr-containing zeolites are efficient catalysts for a wide range of acid-catalysed and redox processes, including the epoxidation of olefins, the conversion of glucose to lactic acid or methyl lactate, among others. Characterization of the surface nature, in particular, the type and concentration of active sites, is a key factor governing their catalytic performance. The point of zero charge (PZC) is a fundamental characteristic of oxide and zeolitic materials that determines the sign and magnitude of the surface charge in aqueous media and exerts a significant influence on their adsorption and acid–base

properties, and further uses of such materials as carriers [1].

In the present work, the pH of the point of zero charge (pH_{pzc}) of Ti-, Sn-, and Zr-containing zeolites was determined by the potentiometric mass titration method (PMT). Representative PMT curves for the tin-silicate Sn-BEA samples are presented in Fig. 1. The pH_{pzc} values were determined as the mean pH in the region of minimum divergence among the curves for each experimental series. The obtained pH_{pzc} values fall within the range of 2.65–2.80 and show only a weak dependence on the nature of the heteroatom incorporated into the zeolite framework and its concentration.

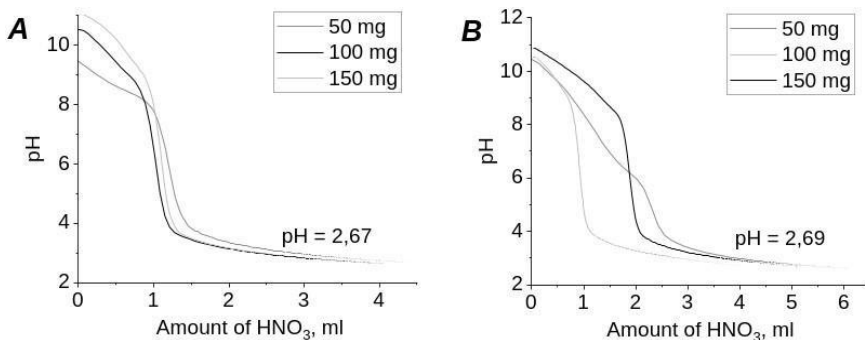


Fig. 1. Representative potentiometric mass titration curves for hierarchical Sn-BEA synthesized using polyvinyl alcohol (A) and Gemini surfactant (B)

References

1. Vakros J., Kordulis C., Lycourghiotis A. Potentiometric mass titrations: a quick scan for determining the point of zero charge. Chemical Communications, 2002, №. 17, pp. 1980–1981.

ЕКСПЕРТНЕ ДОСЛІДЖЕННЯ ПРОПІОНІЛХЛОРИДУ

Мищенко Євгеній, Курочка Альона

Черкаський науково-дослідний експертно-криміналістичний центр МВС України e-mail: mrwoolfluck@gmail.com

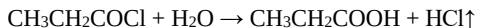
Пропіонілхлорид (CH_3CH_2COCl) – це агресивна, високотоксична (II клас небезпеки) органічна сполука з високою реакційною здатністю, яка є хлорангідридом пропіонової кислоти. Зазвичай використовується для реакції ацилювання в кустарних та промислових синтезах. Токсичність зумовлюється не самою речовиною, а специфікою продуктів миттєвого гідролізу з вологою повітря з великим екзотермічним ефектом, що спричиняє не лише хімічний, а й термічний опік (продукти гідролізу – газ водень хлорид та пропіонова кислота).

Фізичні властивості: прозора, безбарвна рідина з різким задушливим запахом (схожий на запах суміші оцту та хлороводню), сильно «димить» на повітрі, подразнює слизові оболонки, важча за воду ($\rho = 1,059$ г/см³ при 25 °C) та повітря ($D_{пов} = 3,2$), тому пари здатні накопичуватися внизу шафи або біля підлоги). У воді не розчиняється (не встигає – екзотермічний гідроліз), добре розчиняється в органічних апротонних розчинниках (хлороформ, гексан, діетиловий ефір, бензол, дихлорметан та толуол).

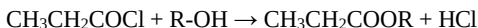
Хімічні властивості:

1. Гідроліз. Реакція екзотермічна. Пропіонілхлорид повністю розкладається на пропіонову

кислоту та хлороводень:



2. Алкоголіз (Естерифікація). Взаємодіє з первинними, вторинними та третинними спиртами, утворює складні ефіри (пропіонати). Проводять у присутності слабких основ для зв'язування хлороводню:

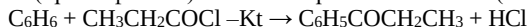


3. Амоноліз. Взаємодіє з первинними та вторинними амінами, утворює аміді: з аміаком:
$$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{COCl} + 2\text{NH}_3 \rightarrow \text{CH}_3\text{CH}_2\text{CONH}_2 + \text{NH}_4\text{Cl}$$

З первинними амінами: $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{COCl} + \text{R-NH}_2 \rightarrow \text{CH}_3\text{CH}_2\text{CONHR} + \text{HCl}$

З вторинними амінами: $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{COCl} + \text{R}_1\text{-NH-R}_2 \rightarrow \text{CH}_3\text{CH}_2\text{CONR}_1\text{R}_2 + \text{HCl}$

4. Реакція Фріделя-Крафтса (ацилювання). Взаємодія з ароматичними вуглеводнями, утворює ароматичні кетони (пропіофенони). Каталізатор кислоти Льюїса (б/в AlCl_3):

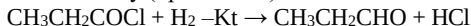


5. Взаємодія з солями карбонових кислот. При нагріванні утворюються ангідриди кислот:

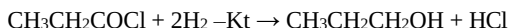


6. Відновлення до альдегідів або спиртів.

Відновлення до альдегідів (реакція Розенмунда). При каталізаторі Pd/BaSO_4 відновлюється до пропіонового альдегіду (пропаналь):



Відновлення до спиртів. При каталізаторі LiAlH_4 відновлюється до первинного спирту (пропан-1-ол):



7. Взаємодія з металоорганічними сполуками. Взаємодіє з реактивом Грин'єра з утворенням кетону, за наявності надлишку металоорганічних сполук відновлюється до третинного спирту.

Пропіонілхлорид внесений до Списку № 1 Таблиці IV «Прекурсори, обіг яких обмежено і стосовно яких встановлюються заходи контролю» Переліку наркотичних засобів, психотропних речовин і прекурсорів (Постанова КМУ від 06.05.2000 № 770), тому може зустрічатися в практиці експертного дослідження та потребує особливого поводження через ряд причин:

1. Речовина має II клас небезпеки та потребує виконання робіт виключно під витяжною шафою та із застосуванням засобів індивідуального захисту, особливо слизових оболонок і дихальних шляхів.

2. Висока екзотермічна реакційна здатність при взаємодії з водою та спиртами (википання та розбризкування) спричиняє значні труднощі в пробопідготовці перед початком дослідження та є додатковим небезпечним фактором.

3. Специфіка речовини (хлорангідрид гідролізує з $\text{pH} \approx 1$) що робить надзвичайно складним пряме безпосереднє дослідження методом газової хроматографії. Замість затримки в хроматографічній колонці відбувається взаємодія з нерухомою фазою колонки та спричиняє її деструкцію. Також продукти гідролізу окислюють та пошкоджують систему вводу проб газового хроматографа ще до потрапляння в колонку.

Для газового хроматографування пропіонілхлориду потрібно забезпечити цілу низку специфічних умов та особливостей, досягти яких звичайним способом практично неможливо. А саме:

1. Забезпечити абсолютну відсутність води в системі, надвисока чистота газу носія – 99,999 %, абсолютно безводні інертні розчинники.

2. Використовувати лише спеціальні кислотостійкі колонки (FFAP) або колонки з диметилполісілоксану (HP-1, DB-1) та застосовувати деактивовану кварцову захисну колонку (довжина 2–5 метрів), яка захищає від потрапляння залишків вологи в основну

колонку.

3. Для системи вводу використовувати прямі лайнери без кварцової вати, які запобігають розкладу пропіонілхлориду, з великим поділом потоку (Split до 1:100), що забезпечує мінімальне потрапляння речовини (нанограми) в колонку.

4. Застосування ПІД-детектора, що більш стійкий до агресивних газів, але має меншу аналітичну чутливість або створення особливих умов детектування для мас-детектора: введення затримки увімкнення філамента (Solvent Delay), щоб нитка розжарення не згоріла через атмосферу агресивних іонів хлору.

Однак, все ж можливо провести дослідження пропіонілхлориду за звичайних умов, враховуючи його особливі фізичні і хімічні властивості, шляхом хроматографування продуктів його естерифікації. Для цього потрібно провести особливу пробопідготовку.

Пропіонілхлорид вступає в реакцію нуклеофільного ацильного заміщення з етанолом (атом Оксигену спирту витісняє атом Хлору), утворюючи етилпропіонат, який має аромат ананасу. Супутнім продуктом реакції є хлороводень, який зв'язують в нерозчинні солі введенням піридину або триетиламіну, що не завжди зручно.

Перед початком реакції пропіонілхлорид та 96 % етанол охолоджують в морозильній камері впродовж кількох годин. Пробу пропіонілхлориду додають невеликими порціями з постійним перемішуванням до значного надлишку спирту (1:10 см³). Після повного вливання проби додають еквівалентну кількість триетиламіну (1:1 моль) або надлишок натрій карбонату з порційним додаванням води до pH 7–8. Після досягнення потрібного рівня кислотності додають порцію гексану ($\approx$ об'єму спирту) для екстракції отриманого складного ефіру – етилпропіонату. Верхній (гексановий) шар збирають та аналізують на хромато-мас-спектрометрі за умов дослідження органічних розчинників. На хроматографі реєструють мас-спектр етилпропіонату, який є інформативним для підтвердження вихідної речовини, що в комплексі з якісними реакціями, характерними для пропіонілхлориду та продуктів його гідролізу, є значною підтверджуючою базою для якісної ідентифікації пропіонілхлориду.

Список використаних джерел

1. National Center for Biotechnology Information (NCBI). Pub Chem Compound Summary for CID 62324, Propionylchloride. URL: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/Propionyl-chloride>.
2. Черних В., Зіменковський Б., Гриценко І. Органічна хімія Підручник для вищих навчальних закладів / ред. В. Черних. 2-ге вид. Харків : НФаУ«ОРИГІНАЛ», 2008. 727 с.
3. Лисенко О., Ковальчук Т., Зайцев В. Основи газової хроматографії. Навчальний посібник. Київ, 2013. 164 с.

ЕКСПЕРТНЕ ДОСЛІДЖЕННЯ ФЕНТАНІЛУ

Дмитро Шинкаренко

Черкаський науково-дослідний експертно-криміналістичний центр МВС України
e-mail: dimashyn91@gmail.com

За оцінками експертів, починаючи з 2021 року сучасний світ зіткнувся з безпрецедентними викликами у сфері контролю за обігом наркотичних засобів та психотропних речовин. Протягом останніх десятиліть завдяки ефективним міжнародним та національним регуляторним заходам, а також підвищенню обізнаності спільноти, спостерігалася тенденція до спаду неконтрольованого використання та розповсюдження класичних наркотичних анальгетиків (опіоїдів) у медичній практиці та, як наслідок, зниження рівня зловживання ними. Цей прогрес дозволяв сподіватися на стабілізацію ситуації із залежністю та наркозлочинністю у багатьох регіонах.

Однак, цей позитивний тренд було кардинально зламано стрімким і небезпечним зростанням незаконного обігу та вживанням синтетичних наркотичних речовин, які належать до групи фентанілу та його високоактивних агоністів. Ці речовини, що мають виняткову фармакологічну силу та малу летальну дозу, швидко стали домінуючим фактором у структурі наркозлочинності та спричинили різке збільшення смертності від передозування у глобальному масштабі, що отримало назву «фентанілова криза» [1].

Ситуація погіршується всупереч прийнятим нормативним документам, дотримання яких контролюють правоохоронні органи на державному рівні. У зв'язку із зазначеним, зросла кількість правових і аналітичних проблем, обумовлених необхідністю розробки і застосування високочутливих, надійних і відтворюваних методів виявлення та ідентифікації вказаних речовин.

До групи фентанілу входить численна кількість речовин, однак часто об'єктом судової експертизи за експертною спеціальністю 8.6 «Дослідження наркотичних засобів, психотропних речовин, їх аналогів та прекурсорів» фіксують наступного представника групи – фентаніл (рис. 1).

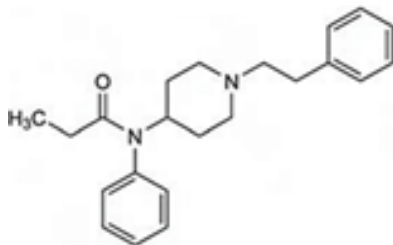


Рис. 1. Структурна формула фентанілу

У відповідності до «Переліку наркотичних засобів, психотропних речовин і прекурсорів», затвердженого Постановою Кабінету Міністрів України № 770 від 06.05.2000 року: фентаніл – таблиця II список I – наркотичний засіб, обіг якого обмежено [2].

Фентаніл має наступні фізико-хімічні властивості: молекулярна маса – 336,5 г/моль, гранульований або кристалічний порошок, добре розчинний у воді, розчинний в метанолі (1:10), в етанолі (1:140), в хлороформі (1:350) та нерозчинний в ефірах [3]. В Україні розповсюджений в лікарських препаратах у формі таблеток, розчину для ін'єкцій та трансдермальних пластирів.

Тонкошарова хроматографія. Для проведення дослідження наважку досліджуваної речовини розчиняють в метанолі за допомогою ультразвукової ванни. Отриманий розчин, а також розчин стандартного зразку, наносять на стартову лінію хроматографічної пластини.

Хроматографування проводять в системах: I. циклогексан : толуол : діетиламін (75:15:10); II.

етилацетат : метанол : 25 % розчин аміаку (85:10:5); III. метанол [3].

Як стандартні можна прийняти такі умови: формат пластинки із закріпленим шаром адсорбенту 100×100 мм, 100×200 мм; активація шару адсорбенту при 110 °С протягом 30 хв; лінія старту в 15–20 мм від нижнього краю пластинки (відстань між плямами 10 чи 15 мм); довжина просування фронту розчинника (старт-фініш) до 100 мм; глибина занурення пластинки в розчинник: 5 мм; камери скляні з пришліфованими кришками, що забезпечують насичення атмосфери внутрішнього об'єму.

Після піднімання лінії фронту розчинника на лінію фінішу, пластинки виймають з камер, підсушують при кімнатній температурі (або в потоці теплого повітря) до повного зникнення запаху розчинників. Пластинки проявляють реактивом Драгендорфа. Орієнтовні значення коефіцієнтів хроматографічної рухливості (R_f) для пластин «Merck TLC Silicagel 60 F254» наведено в таблиці.

Таблиця.

Орієнтовні значення R_f речовин

Система	Значення R_f об'єкта	Значення R_f стандарту	Результат
1	0,15	0,15	позитивний
2	0,70	0,70	позитивний
3	0,10	0,10	позитивний

Наведені значення можуть змінюватися в залежності від умов навколишнього середовища, партій реактивів, хроматографічних пластин, об'єму хроматографічної ванни та інших факторів.

Інфрачервона (IR) спектроскопія. Дослідження методом інфрачервоної спектроскопії дозволяє достатньо точно ідентифікувати фентаніл, при цьому аналізуючи об'єкти дослідження як в наданому вигляді (порошкоподібні речовини), так і після виокремлення компонентів методом екстракції чи препаративної тонкошарової хроматографії (в разі надходження в рідинах, таблетках, тощо). Дослідження зазвичай проводяться в діапазоні реєстрації спектра 4000–400 cm^{-1} з розширенням 4 cm^{-1} .

Приклад молекулярного ІЧ-спектру речовини, відповідно до літературних даних [3], наведено на рис. 2:

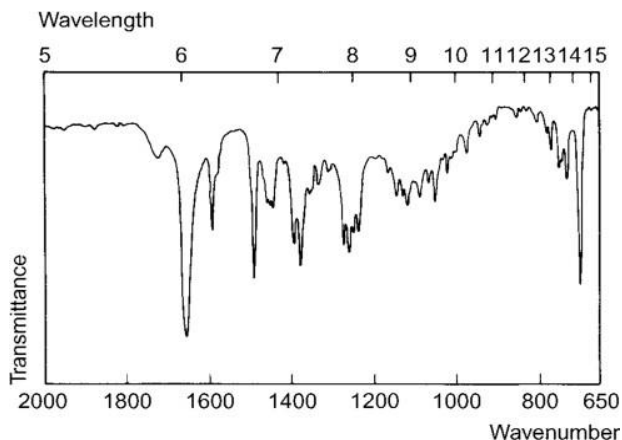


Рис. 2. Інфрачервоний спектр фентанілу

Газова хромато-мас-спектрометрія. З метою визначення органічних компонентів в об'єкті дослідження відбирають наважку речовини (в разі надходження рідини, відібрану від неї аліквоту попередньо висушують до сухого залишку), переносять в скляний флакон, розчиняють в метанолі в кількості 1 см³ та проводять екстракцію на ультразвуковій ванні впродовж 30 хв. Отриманий розчин фільтрують, переносять до віали та досліджують за допомогою газового хроматографа з мас-селективним детектором за вказаних умов [4]: газовий хроматограф – Shimadzu GC 2010 Plus, режим вводу проби, поділ потоку газу-носія – з поділом потоку (Split) 20:1, об'єм проби – 1 мкл, температурна програма термостата хроматографа – 100 °С (тримати 3 хв), нагрів 10 °С/хв до 300 °С (тримати 10 хв), газ-носієй – гелій, потік газу-носія через колонку – 1,2 мл/хв, подача газу-носія – постійна, колонка – J&W, HP-5MS, кат. № 19091S-433, довжина, діаметр, товщина покриття – 30,0 м × 0,250 мм × 0,25 мкм, мас-селективний детектор (МСД) – GCMS-QP2020 EI, режим роботи МСД – за повним іонним струмом (TIC), діапазон сканування 35 – 450 а.о.м., затримка для виходу розчинника – 3,00 хв, температура іонного джерела – 230 °С, температура випарника – 250 °С, температура інтерфейсу – 280 °С.

Під час використання інших приладів (приладів інших фірм-виробників) робочі умови можуть відрізнятися за налаштуваннями мас-детектора, використаного типу колонки, тощо. Аналіз хроматограм проводять за допомогою програмного забезпечення приладу, у даному випадку Lab Solutions GCMS solutions Version 4.45 SP1 із використанням мас-спектральних баз даних NIST та SWGDRUG. Ідентифікацію речовин проводять за часом утримання речовини та за її мас-спектром.

Приклад мас-спектру фентанілу, відповідно до літературних даних [3], наведено на рис. 3.

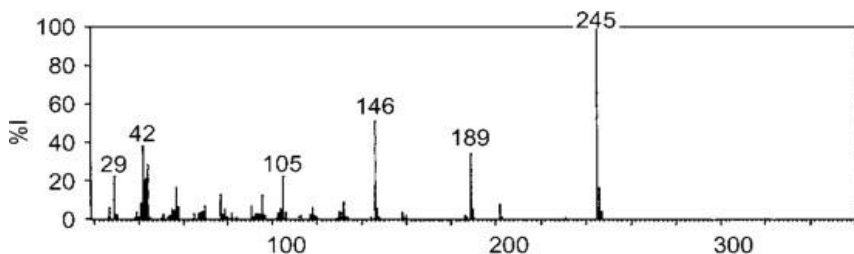


Рис. 3. Мас-спектр фентанілу

Метод газової хроматографії з мас-селективним детектуванням володіє достатньою роздільною здатністю (при зазначених параметрах) для ідентифікації вказаної речовини за часом утримання.

Список використаних джерел

1. Відкритий новинний ресурс IQ, ознайомитись можна за адресою <https://iq.net.ua/fientanilova-krizachi-mozhlivo-zupiniti-potik-smiertonosnikh-narkotikiv-u-ssha/> (дата звернення: 28.05.2026)
2. Перелік наркотичних засобів, психотропних речовин і прекурсорів. Постанова Кабінету Міністрів України № 770 від 06.05.2000 року.
3. Clarke's Analysis of Drugs and Poisons, - Third Ed. Edited by Anthony C Moffat, M David Osselton and Brian Widdop - London: the Pharmaceutical Press, 2004.
4. Стандартна операційна процедура SOP.DSE.19/124/2-5.4-4.02 «Якісне та кількісне дослідження наркотичних засобів, психотропних речовин їх аналогів та прекурсорів методом газової хромато-мас-спектрометрії» відділу ДМРВ Черкаського НДЕКЦ МВС.

ДОСЛІДЖЕННЯ СИНТЕТИЧНОГО КАНАБІНОЇДА MDMB-BUTINACA

Любов Дорошенко

Черкаський науково-дослідний експертно-криміналістичний центр

Міністерства внутрішніх справ України

e-mail: doroshenko.lyubasha@gmail.com

Синтетичні канабіноїди являють собою клас синтетичних агоністів канабіноїдних рецепторів. Ці сполуки індукують психотропні ефекти, характерні для канабісу, шляхом зв'язування з ендогенними канабіноїдними рецепторами (CB₁ та CB₂), які виробляються в організмі людини. На відміну від природних фітоканабіноїдів, таких як тетрагідро- канабінол (THC) та канабідіол (CBD), до синтетичних канабіноїдів відносять структурно різноманітні хімічні сполуки, а також їхні аналоги та похідні [1].

За період з 2020 по 2025 роки збільшення ринку нелегального продажу синтетичних канабіноїдів, що підлягають заходам контролю на території України, а також їх аналогів чи гомологів, набуло критичних масштабів. Серед вказаних, значну кількість в експертній практиці займає такий синтетичний канабіноїд, як MDMB-BUTINACA (рис. 1).

Згідно з «Переліком наркотичних засобів, психотропних речовин і прекурсорів» затвердженою Постановою Кабінету Міністрів України № 770 від 06.05.2000 року, таблиця I, список № 2 – MDMB-BUTINACA віднесена до особливо небезпечних психотропних речовин, обіг яких заборонено.

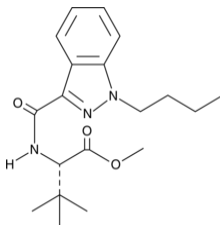


Рис. 1. Структурна формула MDMB-BUTINACA

Відповідно до викладеного, головними питаннями поставленими на виконання перед судовими експертами стали якісна ідентифікація вказаної речовини та її кількісне визначення. Аналітичний підхід, призначений для ідентифікації досліджуваної речовини, передбачає використання декількох не пов'язаних між собою методів.

Підготовка проби до аналізу. Перед початком дослідження від речовини відбирали репрезентативну наважку масою 0,100 г, заливали метанолом об'ємом 2 см³ та проводили екстракцію на ультразвуковій ванні впродовж 30 хв. Отриманий метанольний екстракт фільтрували, переносили до скляної віали та проводили подальше дослідження.

Дослідження методом тонкошарової хроматографії. Для проведення дослідження попередньо приготований екстракт, а також розчин стандартного зразка, наносили на стартову лінію хроматографічної пластини «Merck TLC Silicagel 60 F₂₅₄». Хроматографування проводили в системах: н-гексан : діетиловий ефір (2:1); толуол : діетиламін (9:1); етилацетат : хлористий метилен : метанол : 25 % аміак (18,5:18,3:1) та метанол : 25 % аміак (100:1,5) [1].

З метою детектування хроматографічних зон досліджуваної речовини пластинки оглядали в УФ променях кварцової лампи при довжинах хвиль 254 нм та 312 нм, виявляючи при цьому зони гасіння флуоресценції УФ-випромінювання. Далі пластинки проявляли за допомогою розчину Драгендорфа. Орієнтовні значення коефіцієнтів хроматографічної рухливості (R_f) для пластин «Merck TLC Silicagel 60 F₂₅₄» наведені в таблиці.

Орієнтовні значення R_f для MDMB-BUTINACA

Системи розчинників	MDMB-BUTINACA				
	R_f	Забарвлення – прояв. реактив Драгендорфа	R_f	Флуоресценція при 254 нм	Флуоресценція при 312 нм
I	0,33	Коричневе	0,33	зелено-фіолетова	темно-фіолетова
II	0,83	Коричневе	0,83	зелено-фіолетова	темно-фіолетова
III	0,87	Коричневе	0,87	зелено-фіолетова	темно-фіолетова
IV	0,77	Коричневе	0,77	зелено-фіолетова	темно-фіолетова

Наведені значення можуть змінюватися в залежності від умов навколишнього середовища (вологості та температури повітря), партій реактивів, хроматографічних пластин та інших факторів.

У ході проведеного дослідження встановлено, що вказані системи I, II, III та IV задовольняють умови дослідження для MDMB-BUTINACA.

Дослідження методом газової хромато-мас-спектрометрії. Для проведення дослідження попередньо отриманий екстракт досліджували за допомогою газового хроматографа Agilent Technologies модель 6890N з мас-селективним детектором (МСД) 5975B inert MSD за наступних умов: хроматографічна колонка J&W, HP-5MS, кат. № 19091S-433; температурна програма термостата – 100 °C (тримати 3 хв), нагрів 10 °C/хв до 300 °C (тримати 10 хв); режим вводу проби: з поділом потоку (Split 20:1); газ-носієй – гелій; об'єм проби – 1 мкл; режим роботи МСД – за повним іонним струмом (TIC). При тих же умовах проводили дослідження стандартного зразку речовини MDMB-BUTINACA.

У результаті проведеного дослідження на хроматограмі об'єкта виявлено пік речовини з часом утримання $RT = 20,34$ хв, мас-спектр якої ідентифіковано як MDMB-BUTINACA, що співпадає із літературними даними [4].

Кількісне визначення досліджуваної речовини проводили методом газової хроматографії по методу співвідношення площі піку речовини та стандартної речовини з точно визначеною концентрацією.

Список використаних джерел

1. Вартузов В. В., Барікова О. М., Посільський О. О., Дуброва С. А. Дослідження синтетичних канабіноїдів: метод. реком. Київ, ДНДЕКЦ, 2011, 22 с.
2. Рекомендовані методи виявлення та аналізу агоністів рецепторів синтетичних каннабіноїдів у вилучених матеріалах : Посібник для національних лабораторій експертизи наркотиків : ООН. Секція лабораторного та наукового забезпечення ООН, Управління з наркотиків та злочинності, Відень. ST/NAR/48 - Нью-Йорк, 2014.
3. Перелік наркотичних засобів, психотропних речовин і прекурсорів. Постанова Кабінету міністрів України № 770 від 6 травня 2000 року.
4. Product Description MDMB-BUTINACA Item №. 28739.
URL: <https://www.caymanchem.com/product/28739> (дата звернення: 28.05.2026).

НАНОСТРУКТУРОВАНІ КОМПОЗИТИ НА ОСНОВІ ПРОГЕННОГО КРЕМНЕЗЕМУ ЯК НОСІЇ ІБУПРОФЕНУ ТА КЕТОРОЛАКУ ТРОМЕТАМІНУ

Злата Тимошук, Роман Козакевич

ТОВ «Приватний навчальний заклад «Європейський колегіум» м. Києва Інститут хімії поверхні ім. О. О. Чуйка НАН України
e-mail: tymoshchukolga@ukr.net

Сьогодні людство стикається з викликом «фармацевтичного забруднення» внутрішнього середовища організму. Недоцільне та надмірне вживання ліків, кількість яких стрімко зростає, створює додаткове токсичне навантаження на видільні системи людини та погіршує загальний стан здоров'я. Оригінальність нашого підходу полягає у вирішенні цієї проблеми через «екологізацію» способу доставки діючих речовин. Ми пропонуємо перехід від традиційних форм ліків до інтелектуальних систем контрольованого вивільнення на основі нанокремнеземів.

Актуальність дослідження зумовлена необхідністю створення терапевтичних систем, які:

1. Забезпечують стабільну концентрацію діючої речовини, уникаючи небезпечних «піківів» викидів препарату в крові.
2. Мінімізують хімічний стрес для організму, знижуючи частоту прийому та дозування анальгетиків.
3. Використовують біосумісні наноносії, що є інертними та безпечними для внутрішнього середовища людини.

У роботі проведено комплексний порівняльний аналіз чотирьох форм екологічно безпечних кремнеземних матриць: гідрофільних (А-300, силохром), аміномодифікованих (А-300-NH₂) та гідрофобних (АМ-1-300). Шляхом імпрегнації розроблено інноваційні композити з ібупрофеном та кеторолакутрометаніном, які здатні суттєво покращити якість медикаментозної терапії та зберегти здоров'я пацієнта.

Припускається, що модифікація поверхні нанокремнезему специфічними функціональними групами (аміногрупами та метильними радикалами) дозволить створити стійкі міжмолекулярні зв'язки з молекулами НПЗЗ, що забезпечить ефект «поступового вивільнення» діючої речовини. Це дозволить перетворити потенційно токсичну «ударну» дозу ліків на стабільний терапевтичний потік, безпечний для організму.

Цілі дослідження:

– Отримати композити на основі гідрофільних та модифікованих (гідрофобних, амінованих) форм пірогенного кремнезему.

– Дослідити вплив хімічної природи поверхні носія на швидкість десорбції ібупрофену та кеторолаку.

– Визначити найбільш ефективні матриці для створення систем пролонгованої дії.

У роботі використано комплекс методів, що забезпечують глибину дослідження. Синтез композитів методом імпрегнації (насичення) наноносіїв розчинами лікарських речовин у легких розчинниках. Для ідентифікації отриманих систем та підтвердження взаємодії між компонентами використано метод ІЧ-спектроскопії (аналіз валентних коливань груп у діапазоні 400–4000 см⁻¹). Також використаний метод десорбції згідно з Державною Фармакопеею України – апарат «кошик, що обертається» (швидкість 100 об/хв). Температурний режим – 37 °С (імітація температури тіла людини). Аналіз концентрації проводився методом УФ-спектрофотометрії.

Оцінку повноти десорбції досліджуваних речовин із композитів кремнеземових модифікацій проводили шляхом кількісного визначення вмісту ібупрофену та кеторолакутрометаніну у десорбованих розчинах.

Оцінка кількості десорбованих ібупрофену та кеторолакутрометаніну із композитів на

основі модифікацій пірогеннонанодисперсного кремнезему розраховувалася за результатами визначення оптичної густини кожної з відібраних форм та їх порівнянням із калібрувальним графіком.

Модифікація поверхні кремнезему метильними групами (гідрофобізація) суттєво впливає на профіль вивільнення ібупрофену, роблячи його більш пролонгованим порівняно з вихідним (гідрофільним) кремнеземом. Крива вивільнення ібупрофену з композиту на основі амінованого непористого пірогенного кремнезему має виражений пролонгований та контрольований характер. Утримання ібупрофену обумовлене сильними електростатичними взаємодіями та водневими зв'язками між негативно зарядженими карбоксильними групами ібупрофену та позитивно зарядженими аміногрупами на поверхні кремнезему.

Метильований кремнезем АМ-1-300 демонструє стабільну та повільну десорбцію кеторолакутромтаніну, повне вивільнення ($\approx 97\%$) спостерігається лише на 500–540 хвилині (9 годин). З поверхні пірогенного нанодисперсного кремнезему А-300-NH₂ препарат десорбується протягом 2 годин.

Аналіз ІЧ-спектрів пірогенного нанодисперсного кремнезему А-300-NH₂ до та після десорбції показав, що ібупрофен утримується на модифікованому кремнеземі значно сильніше, і, ймовірно, відбувається взаємодія між ібупрофеном та аміногрупами на поверхні.

Висновки

1. Хімічна модифікація поверхні пірогенного кремнезему є ключовим інструментом керування швидкістю десорбції ліків.

2. Гідрофобний кремнезем АМ-1-300 та амінований А-300-NH₂ є найбільш перспективними «розумними» носіями для анальгетиків.

3. Отримані результати можуть стати базою для створення нових фармацевтичних препаратів тривалої дії, що потребують рідшого прийому (наприклад, 1 раз на добу замість 3-4 разів).

Проект має високий потенціал для впровадження у фармацевтичну галузь та практичну медицину. Для пацієнтів – це зменшення ризику гастритів та виразок, що виникають через пікові концентрації НПЗЗ. Покращення якості життя хворих із хронічним болем. Для екології – це зменшення загальної кількості спожитих медикаментів знижує рівень забруднення стічних вод метаболітами фармацевтичних препаратів (проблема, що набуває глобального масштабу).

Список використаних джерел

1. Bagwe R. P., Hilliard, L. R., Tan W. Surface Modification of Silica Nanoparticles to Reduce Aggregation and Nonspecific Binding. *Langmuir* 2006, 22, 4357–4362, DOI: <https://doi.org/10.1021/la052797j>.
2. Brian C. Smith. Fundamentals of Fourier Transform Infrared Spectroscopy. 2nd Edition. 2011. P207. DOI: <https://doi.org/10.1201/b10777>.
3. Gao Y., Zhang Y., Hong Y. *et al.* Multifunctional Role of Silica in Pharmaceutical Formulations. *AAPS Pharm Sci Tech* 23, 90 (2022). <https://doi.org/10.1208/s12249-022-02237-5>.
4. Kozakevych R., Korobeinyk A., Bolbukh Yu., Tertykh V., Mikhailovska L., Zienkiewicz-Strzałka M., Deryło-Marczewska A. Preparation and characterization of nanocomposite polyvinyl chloride films with NO-generating activity // *Appl. Nanosci.* – 2019. - V.9, N5. - P. 801-808.
5. Roik N. V., Dziasko M. O., Trofymchuk I. M., Oranska O. I. Role of amphiphilic organic additives in design of silica materials with ordered mesoporous structure // *J. Porous Mat.* – 2021. <https://doi.org/10.1007/s10934-021-01167-0>.
6. Герашенко І. І. Фізико-хімічне обґрунтування, розробка та вивчення нових лікарських засобів на основі високодисперсного кремнезему: Автореф. дис. д-ра фарм. наук. – Х., 1997. 38 с.
7. Москаленко О. В., Циганков С. А., Янченко В. О., Циганков А. С. Спектральні методи аналізу: підручник. Ніжин: НДУ імені Миколи Гоголя. 2022. 276 с.
8. Хімія поверхні кремнезема: В 2 ч. / Під ред. академіка НАН України А.А. Чуйко. Київ: 2001.

POLYMETHINE BROWNIAN PHOTOMOTORS

Marina Dekhtyar

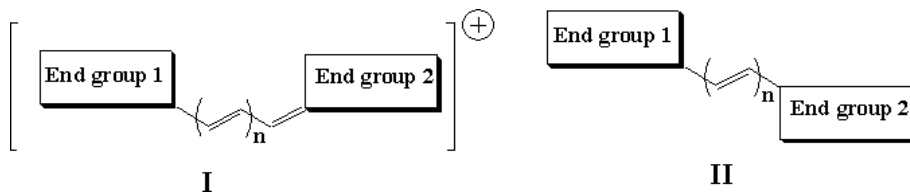
Institute of Organic Chemistry, National Academy of Sciences of Ukraine,

Akademika Kukharya Str. 5, Kiev, 02094, Ukraine

e-mail: mardekhtyar@gmail.com

Earlier, we proposed a model of a Brownian photomotor [1, 2] where a moving particle (molecule) experiences an electrostatic periodic potential generated by a polar substrate and simultaneously undergoes light-driven dichotomic changes in its electron density distribution (EDD) [3]. The performance of such a motor – in particular, its directed velocity and efficiency – improves as the difference between the EDDs of the two photoswitched states of the molecule (the electronic ground state and the lowest excited state) becomes larger.

In search of molecular systems exhibiting substantial EDD redistribution upon photoexcitation, we focus on polymethine compounds, whose electronic properties can be effectively tuned by modifying both the polymethine chain and the end groups [4]. The concept of the ideal polymethine state (IPS) [4] offers a useful framework for understanding the EDD and π -electronic properties of quasi-linear conjugated molecules and therefore provides guidelines for designing efficient photomotor candidates. For example, polymethine systems with the electronic structure sufficiently far from the IPS typically display pronounced differences between the EDDs of the ground and first excited states. Consequently, in odd-chain polymethines **I**, the end groups should possess markedly different electron-donor abilities (see Scheme 1 and Fig. 1), whereas for their even-chain analogues **II**, the opposite requirement applies: the donor abilities of the end groups should be as close as possible (see Scheme 1 and Fig. 2).



*Scheme 1. **I** – polymethines or cyanines (odd-chain, cations), **II** – polyenes or merocyanines (even-chain, neutral molecules); **n** is the number of vinylene groups in the conjugated chain*

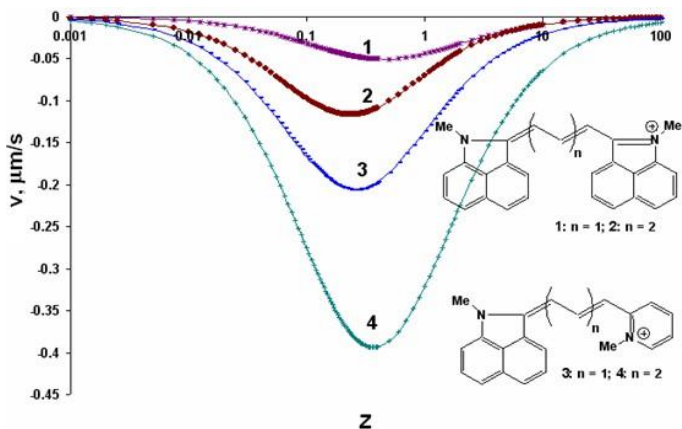


Fig. 1. The average velocity of the Brownian photomotors based on compounds **I** (cyanines, odd-chain polymethine cations) with the varied end-group structure and the length of the polymethine chain

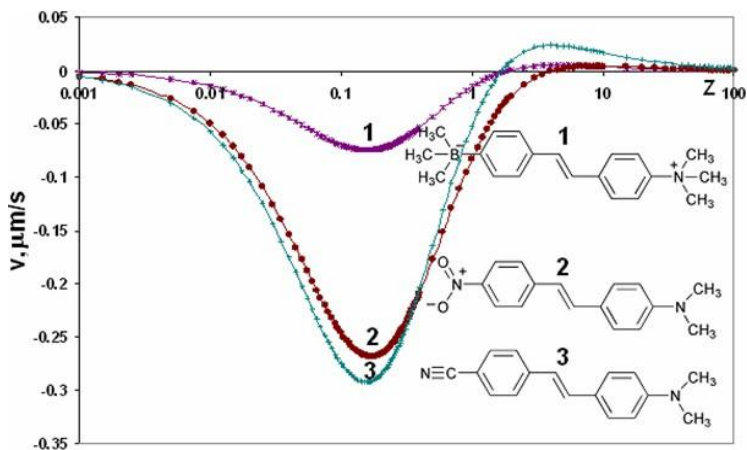


Fig. 2. The average velocity of the Brownian photomotors based on compounds **II** (merocyanines, even-chain polymethine neutral molecules) with the varied end-group structure

References

1. Dekhtyar M. L., *Theor. Exp. Chem.*, 2022, 58, 90.
2. Dekhtyar M. L., Ishchenko A. A., Rozenbaum V. M., *J. Phys. Chem. B*, 2006, 110, 20111.
3. Dekhtyar M. L., Rozenbaum V. M., *J. Chem. Phys.* 2011, 134, 044136.
4. Dähne S., Yesudas K., Dekhtyar M. L., *J. Chin. Chem. Soc.*, 2024, 71, 99.

КРИСТАЛІЧНА СТРУКТУРА ТЕРНАРНИХ ГЕРМАНІДІВ КУПРУМУ ТА ДИСПРОЗІО

Лариса Федина¹, Михайло Федина^{2,3}

¹Львівський національний університет імені Івана Франка,

²Національний лісотехнічний університет України,

³Львівський державний університет безпеки життєдіяльності,

e-mail: fmf@ua.fm

Методами рентгеноструктурного аналізу вивчено кристалічну структуру тернарних германідів Купруму та Диспрозію при 870 К. В потрійній системі Dy–Cu–Ge при температурі дослідження знайдено шість тернарних сполук: DyCu₂Ge₂, Dy₂CuGe₆, Dy₆Cu₈Ge₈, DyCu_{1,25}Ge_{0,75}, DyCu_{0,332}Ge₂ та DyCu_{0,31-0,13}Ge_{1,31-1,49}. Проаналізовано структурні взаємозв'язки тернарних германідів Cu та Dy.

Зразки масою 1 г виплавляли і декілька разів переплавляли для досягнення їхньої однорідності в електродуговій печі з вольфрамовим електродом на мідному водоохолоджуваному поді в атмосфері очищеного аргону. Як гетер використовували губчастий титан. Для наважок використовували метали високої чистоти: диспрозій (99,83 мас. % Dy), мідь (99,99 мас. % Cu) та германій (99,99 мас. % Ge). Склад сплавів контролювали порівнянням маси шихти та виготовлених зразків: при відхиленні маси більше 1 мас. % зразки виготовляли повторно. Сплави гомогенізували при 870 К протягом 750 год у вакуумованих кварцових ампулах. Зразки після відпалу гартували у холодній воді, не розбиваючи ампул.

Порошкові дані для уточнення структурних параметрів отримані на дифрактометрах PHILIPS PW1820 (CuK_α-випромінювання, 2θ інтервал 20-120°, крок сканування 0,02°, час сканування 10 с у кожній точці) для зразка Dy₂₀Cu₄₀Ge₄₀, Guinier Huber G 670 за методом Гін'є на проходження (випромінювання Cu K_{α1}) для Dy₂₂Cu₁₁Ge₆₇, ДРОН-3М (Cu K_α-випромінювання, інтервал 2θ 20-120°, крок сканування 0,02°, час сканування 20 с у кожній точці) для Dy₂₇Cu_{36,5}Ge_{36,5}, Dy₃₃Cu₄₂Ge₂₅ та Dy₃₀Cu₁₀Ge₆₀.

Профільні і структурні параметри уточнювали методом Рітвельда – порівнянням теоретично розрахованих профілів дифрактограм з експериментальними. Усі розрахунки проводили з використанням комплексів програм WinCSD [1] та Full Prof Suite [2]. Кристалографічні характеристики тернарних германідів у системі Dy–Cu–Ge при 870 К наведено в табл. 1, а координати та ізотропні параметри коливання атомів у структурах сполук – в табл. 2.

Таблиця 1.

Кристалографічні характеристики тернарних сполук системи Dy–Cu–Ge

Сполука	СТ	ПГ	СП	Параметри комірки, Å			Літ-ра
				a	b	c	
DyCu ₂ Ge ₂	CeGa ₂ Al ₂	I4/mmm	tI10	4,02904(5)	–	10,29318(4)	[3]
Dy ₂ CuGe ₆	Ce ₂ CuGe ₆	Amm2	oS18	4,09653(4)	3,98882(4)	20,9411(3)	
Dy ₆ Cu ₈ Ge ₈	Gd ₆ Cu ₈ Ge ₈	Immm	oI22	13,8807(3)	6,6264(1)	4,18088(8)	
DyCu _{0,332} Ge ₂	CeNiSi ₂	Cmcm	oS13,33	4,0872(2)	16,1061(8)	3,9594(2)	[5]
DyCu _{1,25} Ge _{0,75}	CaIn ₂	P6 ₃ /mmc	hP6	4,2383(1)	–	7,2472(3)	[6]
DyCu _{0,31-0,13} Ge _{1,31-1,49}	AlB ₂	P6/mmm	hP3	4,0341(2) - 3,956(2)	–	4,0443(3)- 4,084(3)	

Таблиця 2.

Координати та ізотропні параметри коливання атомів у структурах сполук $DyCu_2Ge_2$, Dy_2CuGe_6 , $Dy_6Cu_8Ge_8$, $DyCu_{1,25}Ge_{0,75}$ та $DyCu_{0,332}Ge_2$

Атом	ПСТ	x	y	z	$B_{iso}, \text{\AA}^2$
$DyCu_2Ge_2$ $a = 4,02904(5)$, $c = 10,29318(4)$, $V = 167,090(4) \text{\AA}^3$, $R_{B(l)}=0,0693$, $R_F=0,0542$, $R_P=0,1090$, $R_{wp}=0,1000$, $\chi^2=1,52[3]$					
Dy	2a	0	0	0	0,46(5)
Cu	4d	0	1/2	1/4	0,70(6)
Ge	4e	0	0	0,38087(10)	0,85(5)
Dy_2CuGe_6 $a = 4,09653(4)$, $b = 3,98882(4)$, $c = 20,9411(3) \text{\AA}$, $V = 342,18(1) \text{\AA}^3$, $R_I = 0,0686$, $R_P = 0,1076$					
Dy1	2a	0	0	0,00052(5)	0,67(4)
Dy2	2a	0	0	0,66339(5)	0,71(4)
Cu	2b	1/2	0	0,2269(1)	1,17(9)
Ge1	2a	0	0	0,26978(9)	1,40(8)
Ge2	2a	0	0	0,3855(1)	2,31(9)
Ge3	2b	1/2	0	0,54626(9)	0,52(7)
Ge4	2b	1/2	0	0,1156(1)	1,12(7)
Ge5	2b	1/2	0	0,8953(1)	2,10(9)
Ge6	2b	1/2	0	0,7740(1)	1,89(9)
$Dy_6Cu_8Ge_8$ $a = 13,8807(3)$, $b = 6,6264(1)$, $c = 4,18088(8) \text{\AA}$, $V = 384,56(2) \text{\AA}^3$, $R_B=0,0860$, $R_F=0,1541$ [4]					
Dy1	2d	0	1/2	0	0,69(7)
Dy2	4e	0,1309(2)	0	0	0,60(4)
Cu	8n	0,3303(3)	0,1907(5)	0	1,41(8)
Ge1	4f	0,2144(3)	1/2	0	1,54(9)
Ge2	4h	0	0,1887(6)	1/2	0,86(8)
$DyCu_{0,332(4)}Ge_2$ $a = 4,0872(2)$, $b = 16,1061(8)$, $c = 3,9594(2) \text{\AA}$, $V = 260,64(2) \text{\AA}^3$, $R_B=0,0727$, $R_F=0,0786$ [5]					
Dy	4c	0	0,10474(11)	1/4	0,24(4)
0,332(4) Cu	4c	0	0,3080(5)	1/4	1,75(7)
Ge1	4c	0	0,4506(2)	1/4	1,45(7)
Ge21	4c	0	0,7467(2)	1/4	1,35(7)
$DyCu_{1,25}Ge_{0,75}$ $a = 4,2383(1)$, $c = 7,2472(3) \text{\AA}$, $V = 112,74(1) \text{\AA}^3$, $R_{B(l)}=0,059$, $R_F=0,0449$, $R_P=0,1017$, $R_{wp}=0,0930$, $\chi^2=0,67[6]$					
Dy	2b	0	0	1/4	0,76(6)
M	4f	1/3	2/3	0,4772(7)	1,61(12)

*M = 0,625(3) Cu + 0,375(5) Ge.

За найближчим координаційним оточенням (НКО) навколо найменш електронегативних атомів Диспрозію [7] гексагональні призми формують структури

сполук, що належать до структурних типів AlB_2 (ПГ $P6/mmm$, СП $hP3$) та $CaIn_2$ (ПГ $P6_3/mmc$, СП $hP6$), дещо складнішим є НКО у структурі сполук $DyCu_{0,332}Ge_2$ (СТ $CeNiSi_2$, ПГ $Cmct$, СП $oS16-2,67$) та $DyCu_2Ge_2$ (СТ $CeGa_2Al_2$, ПГ $I4/mmm$, СП $tI10$): гексагональні призми утворюються з двома додатковими атомами навпроти двох бічних суміщених граней та ребра між ними в першій структурі та двома парами центрованих суміщених бічних граней – у другій. У структурі тернарного германіду $Dy_6Cu_8Ge_8$ (СТ $Gd_6Cu_8Ge_8$, ПГ $Immm$, СП $oI22$) навколо атомів Dy можна виділити два типи НКО – у вигляді гексагональної призми з двома центрованими гранями, які знаходяться в поліедрі навпроти, та пентагональної призми з чотирма додатковими атомами. У структурі сполуки Dy_2CuGe_6 (СТ Ce_2CuGe_6 , ПГ $Amm2$, СП $oS18$) можна також виділити два типи поліедрів: навколо атомів Dy1 формуються тетрагональні призми з двома центрованими бічними гранями, які також можна розглядати як гексагональні здеформовані (-2) призми, а НКО атомів Dy2 є у вигляді гексагональних призм з двома додатковими атомами навпроти двох бічних суміщених граней.

Список використаних джерел

1. Akselrud L., Grin. Yu. WinCSD: software package for crystallographic calculations (Version 4) // J. Appl. Crystallogr. 2014. Vol. 47. P. 803–805. DOI:10.1107/S1600576714001058.
2. Rodríguez-Carvajal J. Recent developments of the program FullProf // Commission Powder Diffraction (IUCr). Newsletter. 2001. Vol. 26. P. 12-19. <http://www.iucr-cpd.org/Newsletters.htm>
3. Fedyna L., Bodak O., Tokajchuk Ya., Fedorchuk A., Fedyna M., Mokra I. Crystal structure of the ternary germanides RCu_2Ge_2 (R = Pr, Sm, Dy) // Visn. Lvivuniv. Ser. Khim. 2004. Ed. 44. P. 44–48 (in Ukrainian).
4. Fedyna L., Bodak O., Fedorchuk A., Fedyna M., Tokaichuk Ya. The crystal structures of the compounds $R_6Cu_8Ge_8$ (R = Sm, Dy) // Visn. Lvivuniv. Ser. Khim. 2005. Ed. 46. P. 80–85 (in Ukrainian).
5. Fedyna L., Fedyna M., Fedorchuk A., Tokaichuk Ya. Compound with $CeNiSi_2$ -type structure in systems {Pr, Sm, Dy}–Cu–Ge // Visn. Lvivuniv. Ser. Khim. 2010. Ed. 51. P. 60–68 (in Ukrainian).
6. Fedyna L., Fedyna M. Study of structural parameters of ternary germanide $DyCu_{1,25}Ge_{0,75}$ // Proceedings of the 5th Intern. Scientific and Practical Conference "Modern Perspectives on Global Scientific Solutions" October 13-15, 2025 Bergen, Norway. – P. 40-44. (in Ukrainian).
7. Fedorchuk A., Fedyna M., Kityk I. The nearest coordination environment of atoms in the structures of inorganic compounds // Chernivtsi: Rodovid Publishing House. 2013. 198 p. (in Ukrainian).

АНАЛІТИЧНИЙ ОГЛЯД МЕТОДІВ «ЗЕЛЕНОГО» СИНТЕЗУ НАНОЧАСТИНОК СРІБЛА ТА ЗОЛОТА

Валентина Плющ, Вікторія Бойко

Центральноукраїнський державний університет імені Володимира Винниченка
e-mail: valentyanapl@ukr.net; vikaboiko2222@gmail.com

Дослідження наночастинок в умовах сьогодення є надзвичайно актуальним зв'язку зі зростаючою потребою застосування їх в різних галузях. Ініціативи в галузі нанотехнологій отримують широку державну підтримку в багатьох країнах світу. Наразі для синтезу наночастинок використовують хімічні, фізичні та біометоди (фото- та мікробний синтез як методи «зеленої» хімії). Не зважаючи на високу швидкість реакцій, хімічні та фізичні методи мають ряд суттєвих недоліків, зокрема, є енергетично витратними, екологічно небезпечними, оскільки передбачають використання токсичних речовин, мають проблеми з біосумісністю продуктів тощо. Біосинтетичні або «зелені» методи

синтезу наночастинок не мають окреслених недоліків, що актуалізує їх дослідження на сучасному етапі. Особливо актуальності набуває «зелений» синтез металевих наночастинок (наприклад, срібних і золотих) із використанням рослинних екстрактів через значні можливості їх використання в медицині, екології, фармацевтиці та промисловості.

Для добування наночастинок застосовують екстракти рослинної сировини (листя, корені, квіти, плоди, кору та насіння), що містять велику кількість біологічно активних речовин, серед яких особливе значення мають поліфеноли, флавоноїди, алкалоїди, терпеноїди, білки, амінокислоти та органічні кислоти тощо. Ці сполуки виконують функцію природних відновників і стабілізаторів, забезпечуючи перетворення йонів металів у наночастинки та запобігаючи їх агрегації. В літературі окреслено методи синтезу металевих наночастинок шляхом використання різноманітних біологічно активних речовин. Розглянемо приклади деяких з них (табл.1).

Таблиця 1.

Синтез металевих наночастинок із біологічно активних речовин рослинного походження

Автор синтезу	Речовина / екстракт	Особливості наночастинок
Ahmed S. [1]	флавоноїди	відновлюють іони Ag^+ до срібних наночастинок та забезпечують їх стабільність у колоїдному розчині
Khan I. [2]	фенольні сполуки	підсилюють антибактеріальну активність AgNPs проти патогенних мікроорганізмів
Varma R.S. [3]	рослинні антиоксиданти	прискорюють «зелений» синтез наночастинок та зменшують токсичність процесу.
El-Seedi H.R. [4]	кверцетин	виконує функцію стабілізатора та редукуючого агента для AuNPs і AgNPs
Salam A. [5]	біоактивні метаболіти	впливають на біосумісність і терапевтичні властивості наночастинок
Sharma R. [6]	сапоніни	стабілізують металеві наночастинки під час синтезу

Механізм синтезу металевих наночастинок у рослинних екстрактах включає три основні фази: фаза активації (під час якої відбувається відновлення іонів металу); фаза зростання (під час якої відбувається збільшення термодинамічної стабільності наночастинок) та фазу термінації процесу (під час якої визначається остаточна форма наночастинок).

Аналіз літературних джерел щодо методів синтезу металевих наночастинок засвідчив, що на процес відновлення металів біологічно активними речовинами рослинного походження впливають різноманітні чинники: природа рослинного екстракту (в тому числі частина і вид рослини та вміст біологічно активних речовин в ній, біоредукуючі та стабілізуючі агенти), значення pH реакційної суміші, температура концентрація йонів металі та рослинних екстрактів тощо. Наприклад, використання різних рослинних екстрактів може приводити до утворення сферичних, трикутних або стрижнеподібних наночастинок, які мають різні фізико-хімічні властивості та біологічну активність. Вплив деяких чинників на синтез наночастинок Ag та Au наведено у таблиці 2.

Таблиця 2.

Вплив чинників на синтез наночастинок Ag та Au

Чинник	Автор	Особливості отриманих наночастинок (Ag/Au)
Природа рослинного екстракту (частина та вид рослини)	Naraginti S. [7]	наночастинки Ag з листків <i>Digitaria radicata</i> мають розмір 90 нм
	Muthukumar T. [8]	наночастинки Au з листя <i>Carica papaya</i> мають сферичну, циліндричну, кубічну, трикутну форми, розмір 15–28 нм
	Koperuncholan M. [9]	наночастинки Au з <i>Hygrophilaspinos</i> мають розмір 50–80 нм
Біоредукуючі та стабілізуючі агенти	Shukla V. K. [10]	екстракт <i>Azadirachta indica</i> діє як біоредукуючий та стабілізуючий агент для наночастинок Au та Ag.
	Ghoreishi S. M., Shankar S. [11, 12]	біоредукція іонів срібла (Ag) і золота (Au) відбувається через гідроксильні групи флавоноїдів і терпеноїдів, окиснених до карбонільних груп та за використання апіну.
pH середовища реакційної суміші	Sathishkumar M. [13]	в екстракті <i>Avena sativa</i> за pH 3–4 утворювалися золоті наночастинки невеликого розміру; при pH 2 спостерігалися більші агреговані частинки
	Ghodake G. S. [14]	гексагональні та трикутні нанопластики Au утворюються у лужному середовищі; у кислому середовищі наночастинки не формуються
Температура інкубації	Lukman A. I. [15]	у рослинах люцерни (<i>M. Sativa</i>) трикутні наночастинки Ag утворюються лише за температури вище 30 °C
	Lin L. [16]	в екстрактах рослини <i>Cassia fistula</i> за кімнатної температури формуються переважно срібні (Ag) нанострічки, тоді як за температури вище 60 °C основну масу становлять сферичні наночастинки.

Водночас сучасні наукові дослідження вказують на необхідність удосконалення методів «зеленого» синтезу наночастинок через низку недоліків та обмежень. Зокрема, складність контролю морфології наночастинок (розміру, форми та однорідності); відсутність стандартизації умов синтезу, що призводить до варіативності результатів навіть при використанні однакових типів рослинної сировини (оскільки хімічний склад екстрактів значною мірою залежить від біологічних факторів (вид рослини, умови росту, сезон збору та спосіб екстракції)). Таким чином, проблема зеленого синтезу металевих частинок залишається актуальною та потребує подальшого дослідження з метою його вдосконалення.

Список використаних джерел

1. Ahmed S., Ahmad M., Swami B. L., Ikram S. Plant-Mediated Synthesis of Silver Nanoparticles: Their Characteristic Properties and Therapeutic Applications. *Journal of Nanostructure in Chemistry*. 2016. Vol. 6. P. 1–14. URL: <https://link.springer.com/article/10.1186/s11671-016-1257-4>
2. Khan I., Saeed K., Khan I. Facile green synthesis and applications of silver nanoparticles: a state-of-the-art review. *Nanomaterials*. 2022. Vol. 12, № 10. URL: <https://pmc.ncbi.nlm.nih.gov/articles/PMC9074700/>

3. Iravani S., Varma R. S. Plant-based gold nanoparticles; a comprehensive review of the decade-long research on synthesis, mechanistic aspects and diverse applications. *Advances in Colloid and Interface Science*. 2020. Vol. 284. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0001868619300740>
4. El-Seedi H. R., El-Shabasy R. M., Khalifa S.A.M. et al. Biosynthesis of Gold and Silver Nanoparticles Using Phytochemical Compound. *Nanomaterials*. 2023. Vol. 13, № 7. URL: <https://pmc.ncbi.nlm.nih.gov/articles/PMC10096681/>
5. Salam A., Kandil A. T., Elkomy G. M., Abou-Shleib H. M. Applications of Green Synthesized Metal Nanoparticles. *Biological Trace Element Research*. 2023. Vol. 201. P. 1–23. URL: <https://pmc.ncbi.nlm.nih.gov/articles/PMC10097525/>
6. Sharma R., Patel N., Verma P. A Review of Plant-Based Green Nanoparticle Synthesis: Mechanisms, Metals, and Applications in Nanotechnology. *Revista Electronicade Veterinaria (REDVET)*. 2024. Vol. 25, № 1. URL: https://veterinaria.org/index.php/REDVET/article/view/1657?utm_source=chatgpt.com
7. Naraginti S., Kumari P. L., Das R. K., Sivakumar A., Patil S. H., Andhalkar V. V. Amelioration of excision wounds by topical application of green synthesized, formulated silver and gold nanoparticles in albino Wistar rats. *Materials Science and Engineering: C*. 2016. Vol. 62. P. 293–300.
8. Muthukumar T., Sambandam B., et al. Green synthesis of gold nanoparticles from Carica papaya leaves and their diverse shapes. *Colloids and Surfaces B: Biointerfaces*. 2016. Vol. 141. P. 120–127.
9. Koperuncholan M. Green synthesis of gold nanoparticles using Hygrophila spinosa extract // International Journal of Pharma and Bio Sciences. 2015. Vol. 6, No. 2. P. 241–248.
10. Shukla V. K., Yadav R. S., et al. Green synthesis of silver and gold nanoparticles using Azadirachta indica leaves. *Advanced Materials Letters*. 2012. Vol. 3, No. 3. P. 211–216.
11. Ghoreishi S. M., Behpour M., Khayat Kashani M. Green synthesis of silver and gold nanoparticles using Rosa damascena leaf extract. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*. 2011. Vol. 79, No. 5. P. 1457–1461.
12. Shankar S., Soni S. K., Daima H. K., et al. Flavonoid-mediated synthesis of silver and gold nanoparticles and capping mechanisms. *Materials Chemistry and Physics*. 2015. Vol. 155. P. 122–130.
13. Sathishkumar M., Sneha K., Yun Y. S. (2010). Green synthesis of silver and gold nanoparticles using Avena sativa and Curcuma longa. *Chemical Engineering Journal*, 156(2), 412–420.
14. Ghodake G. S., Deshpande N. G., Lee Y. P., Jin E. S. Pearlescent synthesis of gold nanoparticles in alkaline medium. *Process Biochemistry*. 2010. Vol. 45, No. 8. P. 1349–1353.
15. Lukman A. I., Gong B., Marjo C. E., Roessner U., Harris A. T. Facile synthesis, characterization and mechanistic study of alfalfa leaf extract-mediated silver nanoparticles. *Journal of Materials Chemistry*. 2011. Vol. 21, No. 13. P. 5098–5107.
16. Lin L., Wang W., Huang J., et al. Laboratory-scale synthesis of silver nanostructures using Cassia fistula extracts. *Chemical Engineering Journal*. 2010. Vol. 162, No. 2. P. 842–848.

ДОСЛІДЖЕННЯ КІНЕТИЧНИХ ХАРАКТЕРИСТИК ХІМІЧНИХ РЕАКЦІЙ МЕТОДОМ ФЕМТОСЕКУНДНОЇ СПЕКТРОСКОПІЇ: АНАЛІТИЧНИЙ ОГЛЯД Плющ Валентина, Тимкович Карина

Центральноукраїнський державний університет імені Володимира Винниченка
e-mail: valentyanpl@ukr.net; k.v.tymkovich@cusp.u.edu.ua

Сучасний розвиток хімічної та біологічної наук, різноманітних галузей промисловості потребує глибокого розуміння механізмів перебігу хімічних реакцій на фундаментальному рівні. Більшість елементарних стадій хімічних перетворень, які відбуваються з утворенням та розривом ковалентних зв'язків, перебудовою електронної густини, а також міжмолекулярним переносом енергії відбуваються в фемтосекундному діапазоні (10^{-15} с). Це призводить до того, що традиційні спектроскопічні методи досліджень не придатні для

повноцінного опису таких процесів, що зумовило розвиток надшвидких методів аналізу, серед яких особливе місце займає фемтосекундна спектроскопія [1–3].

Фемтосекундна спектроскопія базується на використанні ультракоротких лазерних імпульсів, тривалість яких порівнювана з характерними часами молекулярної динаміки. Фемтосекундна спектроскопія є потужним інструментом дослідження динаміки молекулярних перетворень, що дозволяє в режимі реального часу спостерігати еволюцію хімічних систем після збудження лазерним імпульсом. Основним експериментальним підходом методу є схема «pump–probe» («збудження–зондування»), у якій перший імпульс ініціює хімічну реакцію шляхом переведення системи у збуджений електронний стан, а другий імпульс реєструє стан системи через точно контрольований часовий інтервал, що дає змогу формувати своєрідну «молекулярну кінокамеру», яка фіксує послідовні стадії реакції з фемтосекундною роздільною здатністю. Таким чином забезпечується можливість реконструювання потенціальних поверхонь реакцій, визначення перехідних чи проміжних станів, траєкторії атомних переміщень.

Аналіз літературних джерел засвідчує, що фемтосекундна спектроскопія дозволяє не лише реєструвати кінцеві продукти реакцій, а й виявляти проміжні, надзвичайно нестабільні стани, які раніше залишалися «невидимими» для експериментальних методів. Це значно поглиблює розуміння механізмів хімічних перетворень та дозволяє уточнювати кінетичні моделі реакцій [1–3]. Варто зауважити, що сучасні фемтосекундні методи забезпечують одночасне спостереження як електронної, так і ядерної динаміки, що є надзвичайно важливим для пояснення зв'язку між структурою молекули та її реакційною здатністю [1, 3].

Використання фемтосекундних лазерів надало можливість аналізувати механізми перенесення енергії, фотоіндуковані процеси, зміни електронних і коливальних станів молекул, а також досліджувати реакційні шляхи з високою часовою точністю. Наразі відомі різні види фемтосекундної спектроскопії, короткий аналіз деяких видів подано у таблиці 1.

Таблиця 1.

Види фемтосекундної спектроскопії та їх застосування

Метод	Принципи та можливості	Застосування
Фемтосекундна спектроскопія (pump–probe)	Використання ультракоротких лазерних імпульсів у фемтосекундному діапазоні за схемою «pump–probe» («збудження–зондування»): перший імпульс переводить систему у збуджений стан та ініціює реакцію, а другий через контрольований часовий інтервал фіксує її стан [1–3]	Дослідження надшвидких хімічних процесів: утворення та розрив хімічних зв'язків, динаміку електронних і ядерних процесів, проміжні короткоживучі стани реакцій. Використовується у фізичній хімії, молекулярній біології, фотохімії та матеріалознавстві [1–3]
Фемтосекундна стимульована раманівська спектроскопія (FSRS)	Реєстрація індукованого раманівського розсіювання. Поєднання високої часової роздільної здатності із детальною спектральною інформацією про коливальні стани молекул [1–3]	Дослідження змін частот молекулярних коливань, аналізу зміни довжин і сил хімічних зв'язків, отримання «моментальні знімки» структурних змін у режимі реального часу, процесів перенесення енергії та виявлення

		короткоживучих інтермедіатів. Використовується у дослідженнях фотосинтетичних комплексів, білків, нуклеїнових кислот, а також для аналізу ранніх структурних і конформаційних змін у біомолекулярних системах
Часово-розділена фотоелектронна спектроскопія (TRPES)	Лазерне збудження молекули з подальшою емісією фотоелектронів. Аналіз енергетичних і часових характеристик електронів дозволяє простежити зміни електронної структури молекули	Доповнює раманівські методи, забезпечуючи комплексне вивчення електронної та ядерної динаміки хімічних систем. Дас можливість спостерігати еволюцію електронних станів та виявляти «темні стани», недоступні для класичних спектроскопічних методів. Використовується для дослідження фотохімічних процесів, механізмів ізомеризації, фотодисоціації та реакцій перенесення заряду [4–5]
Двовимірна фемтосекундна спектроскопія	Дозволяє одночасно аналізувати взаємодії між різними енергетичними станами молекул; забезпечує розділення перекритих спектральних сигналів, встановлення кореляцій між різними процесами у системі та дослідження когерентних квантових ефектів	Дослідження перенесення енергії у складних системах, зокрема фотосинтетичних комплексах. Забезпечує більш інформативні спектри порівняно з одномірними методами. Використовується для аналізу багатомолекулярних систем, у яких одночасно відбуваються кілька конкуруючих процесів, а також для дослідження квантової когерентності [6].
Фемтосекундна лазерна індукована спектроскопія пробою	Ґрунтується на створенні лазерного пробою речовини ультракоротким імпульсом та подальшому аналізі спектра випромінювання плазми. Метод характеризується мінімальним тепловим впливом на зразок, що дозволяє проводити високоточний аналіз із мінімальним пошкодженням матеріалу	Використовується для елементного аналізу матеріалів, контролю якості, моніторингу хімічного складу речовин та дослідження поверхонь. Використовується для аналізу біологічних об'єктів, мікроструктур, наноматеріалів і чутливих зразків [7]

Аналіз літературних джерел засвідчив, що саме фемтосекундна стимульована раманівська спектроскопія (FSRS) є одним із найінформативніших методів у межах надшвидкої спектроскопії. Її перевага полягає у поєднанні високої часової та спектральної роздільної здатності, що дозволяє одночасно відстежувати як динаміку молекулярних

коливань, так і структурні перебудови системи. Це робить FSRS особливо ефективною для дослідження фотохімічних реакцій, процесів перенесення енергії, а також динаміки складних біомолекулярних систем, включаючи фотосинтетичні комплекси.

Це одним із важливих напрямків розвитку надшвидкої спектроскопії є часово-розділена фотоелектронна спектроскопія, яка застосовується для вивчення електронної структури молекул та динаміки фотохімічних реакцій [4, 5], забезпечує детальне вивчення електронної структури молекул у процесі їхньої еволюції, що дозволяє реконструювати траєкторії електронних переходів, визначати часові характеристики фотоіндукованих процесів та виявляти короткоживучі електронно-збуджені стани.

Це суттєво доповнює дані, отримані за допомогою раманівських методів, і забезпечує комплексне уявлення про як структурну, так і електронну динаміку реакцій.

Окремо слід відзначити значущість двовимірна фемтосекундна спектроскопія, що забезпечує глибше розуміння взаємодій між молекулярними станами, дозволяє встановлювати складні взаємозв'язки між різними квантовими станами молекулярних систем. Завдяки здатності розділяти перекриті спектральні сигнали цей метод забезпечує більш глибоке розуміння механізмів перенесення енергії, когерентних процесів та нелінійної динаміки у складних молекулярних структурах.

Таким чином, фемтосекундна спектроскопія є потужним та універсальним інструментом дослідження хімічної динаміки, який забезпечує принципово новий рівень розуміння молекулярних процесів. Її подальший розвиток сприятиме поглибленню знань про механізми хімічних реакцій, удосконаленню експериментальних методів дослідження та розширенню можливостей їх практичного застосування в різних галузях науки і техніки. Перспективи розвитку цього напрямку пов'язані з підвищенням точності вимірювань, інтеграцією багатовимірних методів спектроскопії та застосуванням нових лазерних технологій для дослідження ще складніших молекулярних систем.

Список використаних джерел

1. Mc Camant D. W., Frontiera R. R., Mathies R. A. Освоєння фемтосекундної стимульованої раманівської спектроскопії: практичний посібник // *ACS Physical Chemistry Au*. 2024. Т. 4, № 1. С. 12–35. URL: <https://pmc.ncbi.nlm.nih.gov/articles/PMC10811773/>
2. Kang D.-G., Woo K. C., Kang D. H., Park C., Kim S. K. Покращення спектральної роздільної здатності фемтосекундної стимульованої раманівської спектроскопії шляхом використання дифракції другого порядку // *Scientific Reports*. 2021. Т. 11. Ст. 3361. DOI: 10.1038/s41598-021-83090-7. URL: https://www.nature.com/articles/s41598-021-83090-7?utm_source
3. Yu Q., Yao Z., Zhou J. та ін. Перехідна спектроскопія та візуалізація стимульованого раманівського розсіювання // *Light: Science & Applications*. 2024. Т. 13. Ст. 70. DOI: 10.1038/s41377-024-01412-6. URL: https://www.nature.com/articles/s41377-024-01412-6?utm_source
4. Stange A., Rohwer T., Hellmann S. та ін. Часово-розділена фотоелектронна спектроскопія поверхонь // *Surface Science*. 2025. Т. 753. Ст. 122631. DOI: 10.1016/j.susc.2024.122631 URL: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0039602824001821?utm_source
5. Stolow A., Underwood J. G. Часово-розділена фотоелектронна спектроскопія неадиабатичної динаміки в багатоатомних молекулах. URL: https://arxiv.org/abs/1507.02204?utm_source
6. Improta R., Santoro F., Blancafort L. Двовимірна УФ-спектроскопія: новий погляд на структуру та динаміку біомолекул // *ChemicalScience*. 2019. Т. 10, № 43. С. 9907–9921. DOI: 10.1039/C9SC03871J URL: https://www.sciencedirect.com/org/science/article/pii/S2041652023050332?utm_source
7. Gaudiuso R., Dell'Aglio M., De Pascale O., Senesi G. S., De Giacomo A. Лазерно-індукована спектроскопія пробою для елементного аналізу у сфері охорони довкілля, культури та космічних досліджень // *Sensors*. 2010. Т. 10, № 8. С. 7434–7468. DOI: 10.3390/s100807434. URL: <https://www.mdpi.com/1424-8220/10/8/7434>

ОПТИМІЗАЦІЯ ЕКСТРАКЦІЇ ТА ХРОМАТОГРАФІЧНОГО ВИЗНАЧЕННЯ КАНАБІНОЇДІВ У ЖЕЛАТИНОВИХ ПАСТИЛКАХ НА ОСНОВІ ДОСВІДУ АНАЛІЗУ СКЛАДНИХ МАТРИЦЬ

¹Сергій Шкурдода, ¹В'ячеслав Пасічник, ²Іван Архіпов

¹Черкаський науково-дослідний експертно-криміналістичний центр
Міністерства внутрішніх справ України

²Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького
e-mail: sergeyshkur@yahoo.com

Вступ. Попередні напрацювання дослідницької групи Черкаського НДЕКЦ МВС показали, що для якісного виявлення Δ^9 -тетрагідроканабінолу (Δ^9 -ТГК) (яка є психотропною речовиною, обіг якої обмежено) у насінні технічних конопель та продуктах харчування з рослин конопель, найбільш ефективним є метод рідинно-рідинної екстракції ацетонітрилом із подальшим промиванням гексаном для відділення заважаючих олійних (жирових) фракцій [1, 2]. При переході до концентрованих олійних розчинів цей підхід було еволюційно та вдосконалено шляхом впровадження лужної трансестерифікації метилатом натрію за ДСТУ EN ISO 12966-2:2019, що дозволило перевести заважаючи тригліцериди вищих жирних кислот у леткі метилові ефіри, звільняючи аналітичне вікно для якісного та кількісного визначення ТГК із межею детектування (LOD) 2 мг/г.

Однак, поява нових кондитерських дозованих форм з вмістом канабіноїдів у вигляді желатинових пастилок висунула нові виклики. Желатин є високомолекулярною сполукою білкового походження, яка утворює міцні просторові гелі. Вказані гелі блокують ліпофільні канабіноїди всередині структури, а метод лужної трансестерифікації для таких гідрофільних систем виявився незастосовним, що є суттєвим для визначення як психотропної речовини Δ^9 -тетрагідроканабінолу, так і інших канабіноїдів, насамперед канабідіолу (КБД), канабігеролу (КБГ), канабіхромену (КБХ) тощо.

Метою дослідження є модифікація експрес-методу QuEChERS [5] та адаптація раніше оптимізованих для рослинної сировини параметрів ГХ-МС/ГХ-ПІД аналізу з метою якісного та кількісного визначення канабіноїдів у желатинових пастилках із повним нівелюванням матричного ефекту білкових речовин желатину.

Матеріали інструменти та методики дослідження. Об'єктами дослідження виступали желатинові пастилки, які містили канабіноїди. Аналіз виконували на хроматографічних комплексах Shimadzu GC 2010 Plus з мас-селективним детектором GCMS-QP2020 EI та GC Agilent Technologies 6890A (G1530A) з полум'яно-іонізаційним (ПІД) детектором. Розділення здійснювали на капілярних колонках типу J&W, HP-5MS, кат. № 19091S-433 (30,0 м × 0,25 мм × 0,25 мкм) у режимі введення з поділом потоку Split 20:1. Газ-носії – гелій, об'єм проби 1 мкл. Аналітичне розділення компонентів здійснювали за умов оптимізованого температурного градієнта термостата хроматографа методу DS7 [3]: початкова температура 80 °C → ізотерма 2 хв → лінійний підйом зі швидкістю 20 °C/хв до 200 °C → підйом зі швидкістю 4 °C/хв до 240 °C → ізотерма 5 хв → підйом зі швидкістю 25 °C/хв до 280 °C → ізотерма 2 хв.

Модифікована методика пробопідготовки: від об'єкта дослідження відбирали індивідуальну наважку пастилки масою близько 1,3 г та здійснювали її термічну солюбілізацію у деіонізованій водній фазі за температури 50–60 °C на ультразвуковій ванні до повного руйнування желатиново-гліцеринового гелю. Екстракцію цільових компонентів проводили шляхом додавання 5,0 мл етилацетату з наступним висолюванням безбуферною сумішшю солей $MgSO_4$ та $NaCl$ та піддавали інтенсивному механічному

перемішуванню на вихровому змішувачі (вортексі) протягом 20 хв. Отриманий органічний шар піддавали криогенному очищенню за температури мінус 20 °С протягом 2 годин із подальшим фільтруванням очищеної аліквоти у хроматографічну віалу.

Виклад основного матеріалу

В основу хроматографічного розділення покладено температурний режим, який пройшов еволюційний шлях оптимізації від модифікацій DS1 до фінального протоколу DS7 [2, 3], що забезпечує повне розділення складних сумішей канабіноїдів та терпенів і терпеноїдів. Процедуру екстракції було адаптовано під желатинову матрицю та порівняно з базовими міжнародними та європейськими стандартами (Таблиця 1).

Таблиця 1.

Порівняльна характеристика класичного протоколу QuEChERS та розробленої модифікації

Етап аналізу	Класичний метод QuEChERS (Anastassiades et al., 2003) [4]	EN 15662 (DCTY EN 15662) [5]	AOAC 2007.01 [6]	Модифікований метод (розроблено в лабораторії ВДМРБ)
Попередня підготовка	Механічна гомогенізація (подрібнення рослинної тканини).	Механічна гомогенізація (додавання води для сухих матриць)	Механічна гомогенізація (переважно криогенне подрібнення)	Додано етап: Термічна солюбілізація наважки у H ₂ O за 50–60 °C
Екстрагент	Ацетонітрил	Ацетонітрил	Ацетонітрил з додаванням 1% розчину оцтової кислоти	Етилацетат
Висоловвання (розділення фаз)	Суміш безводного MgSO ₄ та хлориду натрію (NaCl) без додавання буферних солей	Цитратний буфер (MgSO ₄ + NaCl + цитрати натрію)	Ацетатний буфер (MgSO ₄ + CH ₃ COONa)	Суміш безводного MgSO ₄ та NaCl без додавання буферних солей
Очищення екстракту	Дисперсійна твердофазна екстракція (d-SPE) на сорбенті PSA.	d-SPE (сорбент PSA, MgSO ₄ , за потреби C18/GCB)	d-SPE (сорбент PSA, MgSO ₄ , за потреби C18).	d-SPE повністю виключено. Криогенне осадження баластних сполук, мінус 20 °C, 2 год

1. Етилацетат є значно більш селективним розчинником для ліпофільних канабіноїдів у в'язких водних білкових розчинах і менше ко-екстрагує цукри, які значно заважають якісному та кількісному визначенню канабіноїдів та фітолів.

2. Заміна ацетату чи цитрату на NaCl забезпечує максимальний ефект висоловвання у системі вода–етилацетат, депонуючи гідролізовані фрагменти білка у воді.

3. Сорбент PSA розрахований на рослинні кислоти, але миттєво блокується залишками желатину. Кріовитримування ефективно депонує макромолекули білків та полісахаридів без втрат КБД та Δ9-ТГК.

4. На відміну від ацетонітрилу, який необмежено змішується з водою і ко-екстрагує полярні пептидні фрагменти желатину, етилацетат володіє низькою взаємною

розчинністю з водною фазою (близько 3,3 %). Впровадження безбуферної суміші MgSO_4 та NaCl забезпечує максимальний ефект висолювання (salting-out), що знижує взаємне змішування розчинників практично до нуля та надійно блокує деградований білок у нижньому водному шарі. Це дозволяє селективно вилучити гідрофобні канабіноїди у верхню органічну фазу, повністю нівелюючи матричний ефект під час подальшого дослідження методом газової хроматографії (ГХ-МС/ГХ-ПІД).

Результати досліджень та їх обговорення. Впровадження водної солюбілізації та криогенного очищення дозволило отримати прозорі етилацетатні екстракти без ознак емульгування. При дослідженні методом ГХ-МС в желатинових пастилках було зафіксовано чіткі піки розділених компонентів та надійно ідентифіковано канабіноїди, в тому числі Δ^9 -тетрагідроканабінол шляхом комп'ютерного зіставлення з референтними базами NIST та SWGDRUG. Кількісне визначення маси канабідіолу та Δ^9 -ТТК в подальшому виконували методом ГХ-ПІД за інструментальних умов оптимізованого градієнта DS7. Температура детектора газового хроматографу 250 °C, потік водню – 40 мл/хв, потік повітря 400 мл/хв. Для забезпечення статистичної достовірності було реалізовано схему паралельних визначень індивідуальних пастилок. Ступінь вилучення (recovery) аналітів за розробленою методикою становив > 92 %.

Висновки. Модифікований метод QuEChERS із заміною ацетонітрилу на етилацетат та впровадженням стадії термічної солюбілізації та криогенного очищення у поєднанні з оптимізованим температурним градієнтом ГХ-термоста та DS7 дозволяє повністю нівелювати заважаючий матричний ефект желатину в дозованих харчових продуктах. Метод демонструє високу селективність, точність і відтворюваність, що дозволяє рекомендувати його для уніфікації та впровадження в експертну практику хімічних лабораторій Експертної служби МВС України.

Список використаних джерел

1. Шкурдода С. В., Солодовнік Т. В., Пасічник В. В. Король К. П., Шинкаренко Д. Ю. (2021). Методики визначення вмісту дельта-9 тетрагідроканабінолу в насінні конопель методом газової хроматографії: аналіз і наукове обґрунтування. Вісник Черкаського державного технологічного університету, 1/2021, 173-182. DOI: 10.24025/2306-4412.1.2021.230000.
2. Шкурдода С. В. Пасічник В. В., Король К. П. Якісне та кількісне визначення канабіноїдів у частинах рослин конопель методом хромато-мас-спектрометрії: Методичні рекомендації. К.: ДНДЕКЦ МВС, 2019. 54 с.
3. Шкурдода С. Якісне дослідження канабіноїдів у рослинах роду канабіс // Криміналістика та судова експертиза: сучасний стан і перспективи розвитку : матеріали II Всеукр. наук.-практ. конференції з нагоди 25-річчя Експертної служби МВС України (м. Київ, 20 червня 2025 р.) / відп. упоряд.: К. М. Ковальов, Д. П. Гуріна, О. П. Воробйова, Н. С. Житник, О. П. Чміленко. Київ : ДНДЕКЦ МВС України, 2025. С. 747–751.
4. Anastassiades M., Lehotay S. J., Štajnbaher D., Schenck F. J. Fast and easy multiresidue method employing acetonitrile extraction/partitioning and “dispersive solid-phase extraction” for the determination of pesticide residues in produce. *Journal of AOAC International*. 2003. Vol. 86, №. 2. P. 412–431. <https://doi.org/10.1093/jaoac/86.2.412>
5. EN 15662:2018. Food of plant origin – Determination of pesticide residues using GC-MS and/or LC-MS/MS following acetonitrile extraction/partitioning and clean-up by dispersive SPE – QuEChERS method. Brussels: CEN, 2018. 83 p.
6. Lehotay S. J. Determination of pesticide residues in foods by acetonitrile extraction and partitioning with magnesium sulfate: collaborative study. AOAC Official Method 2007.01. *Journal of AOAC International*. 2007. Vol. 90, №. 2. P. 485–520.

СЕКЦІЯ 3. ЕЛЕКТРОХІМІЯ

ЕЛЕКТРОХІМІЧНЕ ВИЛУЧЕННЯ МІДІ З РОЗЧИНІВ ТРАВЛЕННЯ

Наталія Корчик, Надія Буденкова, Оксана Мисіна

Національний університет водного господарства та природокористування
вул. Соборна, 11, 33000, м. Рівне. e-mail: o.i.mysina@nuwm.edu.ua

Гальванічне виробництво є джерелом забруднення навколишнього середовища іонами металів, що мають токсичну, канцерогенну дію, та поступають у формі рідких відходів. Відповідно до концепції циклічної економіки в галузі ефективних та стійких технологій очищення стічних вод [1] включає фізичні, хімічні, фізико-хімічні або електрохімічні методи. З іншого боку концентровані відходи у формі відпрацьованих технологічних розчинах (ВТР) гальванічних виробництв можна розглядати як цінний ресурс для добування металів. Застосування електрохімічних процесів є перспективним у технологіях комплексної переробки ВТР з метою їх повернення в технологічний процес (регенерація), застосування їх у якості хімічних реагентів, вилучення металів та інших компонентів у формі, яка підлягає подальшій утилізації. Метою досліджень було обґрунтування застосування електролізу як елемента комбінованої системи очисних споруд в технологіях утилізації та регенерації кислих мідьвмісних ВТР від операцій підготовки поверхні та покриття [2]. Об'єктом дослідження були модельні розчини, кислі ВТР від операцій підготовки поверхні та покриття (матові, блискучі). Кислотно-основні та окисно-відновні властивості концентрованих стічних вод ділянки травлення та умови їх обробки з метою очищення, регенерації, утилізації, вивчали методами потенціометричного титрування та хімічного осадження в реакторі періодичної дії при інтенсивному перемішуванні реагуючих речовин.

За даними, наведеними на рис. процеси катодного вилучення міді в діафрагмовому електролізері (катодна камера) в інтервалі концентрації від 1,15 моль/л – 0,63 моль/л витрата струму D складає від $180 \cdot 10^3$ Кл/моль до $900 \cdot 10^3$ Кл/моль.

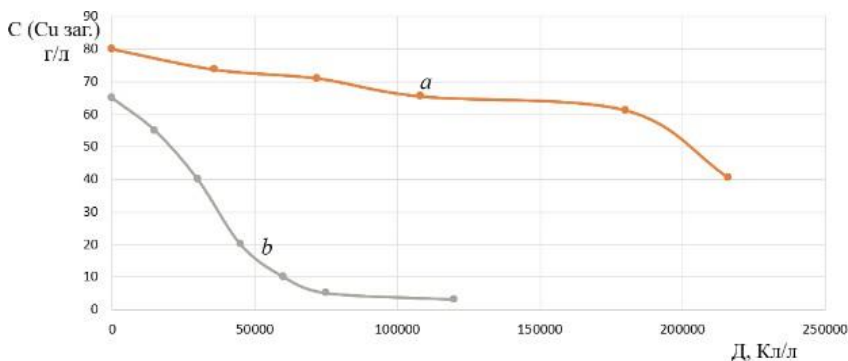


Рис. Зміна концентрації міді з хлоридних ВТР (густина струму $i = 200 \text{ А/м}^2$) від витрати струму:

а) в катодній камері; б) з суміші катодної та анодної камер

При цьому ступінь вилучення (в межах концентрацій 1,15 моль/л – 0,63 моль/л) складає 45 %, а вихід за струмом – від 20 % до 55 % відповідно. Швидкість процесу від $0,01 \cdot 10^{-3}$ моль/с до $0,05 \cdot 10^{-3}$ моль/с.

Таким чином, катодне вилучення міді з ВТР гальванічних виробництв доцільно здійснювати в комбінованих системах, що включає їх попередню обробку в локальних циклах з застосуванням електролізу, як основного методу та подальшу їх обробку на централізованих станціях призначених для основного об'єму стічних вод від операцій промивання. При цьому з врахуванням об'ємів та періодичності скидів для сульфатнокислих ВТР покриття рекомендований цикл з катодним вилученням міді для подальшої утилізації. Для хлоридних ВТР травлення рекомендований цикл катодного вилучення міді для подальшої утилізації та окиснення розчину для повернення у виробничий процес (цикл регенерації). Для виключення вторинного забруднення води в системах очищення стічних вод пропонується відмовитися від застосування в локальних циклах реагентів на всіх стадіях очищення (утилізації, регенерації) ВТР і використовувати електрохімічну технологію, що дозволяє в широких межах змінювати фізико-хімічні властивості розчину.

Список використаних джерел

1. K. I. Dermentzic, D. I. Marmanis, A. K.Christoforidis, D. K. Storgiopoulos. Electrochemical recover of metallic copper from galvanic effluents. Physical chemistry. 2016. P. 1-4.
2. Mykola Yatskov, Natalia Korchyk, Nadia Budenkova, Oksana Mysina, Serhii Kovalchuk. Determination of main technological parameters in the process of electrochemical extraction of copper from sulfate acid concentrated technological solutions. "Eastern-European Journal of Enterprise Technologies" №5 (137) 2025. P. 41-51. DOI: 10.15587/1729-4061.2025.341531 <https://journals.urau.ua/eejet/issue/view/19861>

ЕЛЕКТРОХІМІЧНІ ДОСЛІДЖЕННЯ ПРОЦЕСУ ОКИСНЕННЯ ЛІЗИН ГІДРОХЛОРИДУ

Олександр Шевченко, Олена Жабковська, Софія Мандрабура

Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького

e-mail: pogrebniak_oleg@ukr.net

Амінокислоти є важливими будівельними блоками біологічних молекул які відіграють ключову роль у багатьох нейрохімічних механізмах реакцій, таких як пам'ять, контроль апетиту та передача болю. Порушення регуляції амінокислот пов'язують з багатьма розладами, такими як хвороби Хантінгтона, Альцгеймера та Паркінсона Розробка простого та універсального методу виявлення цих сполук покращить розуміння їхньої біологічної ролі та полегшить розробку нових ліків для цих захворювань [1].

Амінокислоти – це важливі біологічно активні сполуки з зарядженими, полярними та гідрофобними групами. Їхня адсорбція залежить від структури та гідратації цвіттер-іонів, що впливає на механізм електроокиснення. Амінокислоти входять до складу білків, пептидів, гормонів і антибіотиків, регулюють життєві процеси та відіграють ключову роль у метаболізмі. Окиснення, необхідне для функціонування клітин, спричиняє деструкцію, деполімеризацію та карбоксилювання білків. Білкові системи стали важливими об'єктами електрохімії, яка поєднує біохімію, біофізику та генну інженерію для створення сучасних методів аналізу та ідентифікації.

Лізин є однією з трьох найважливіших незамінних амінокислот, які наш організм може отримати тільки з їжі. Він є основою для побудови білків нашого тіла. Лізин - перша з лімітуючих амінокислот, необхідних для засвоєння харчових білків: при його нестачі, скільки б не було білків у їжі, вони все одно не засвоюються. Для побудови білків наше тіло використовує тільки L-лізин.

Широкі дослідження були спрямовані на розробку електрокаталізаторів, спрямованих на зниження зазвичай великої перенапруги та підвищення фарадєївського струму, що виникає при електроокисненні деполаризатора. Останнім часом велика увага приділяється матеріалам, іммобілізованим на поверхні електроду та здатним опосередковувати швидке перенесення електронів під впливом зовнішніх електричних полів, а саме хімічно модифікованим електродам. Завдяки окисно-відновним властивостям можна виявити та кількісно визначити амінокислоти за допомогою електрохімічного датчика без обробки зразку деполаризатора. Проте існують серйозні проблеми, які необхідно подолати, перш ніж електрохімічні методи можуть бути використані для таких досліджень. Однією з проблем електрохімічного визначення амінокислот є відсутність електрохімічного відклику деяких амінокислот на електродах.

Наноструктуровані електроди з різними типами модифікації проявляють виражений електрокаталітичний ефект під час окиснення та відновлення як органічних, так і неорганічних сполук. Це зумовлено зниженням перенапруги електродних процесів, а також підвищенням селективності й чутливості застосовуваних аналітичних методів.

Посилення інтенсивності окиснення органічних речовин на металевих поверхнях досягається не лише завдяки зміні зовнішніх геометричних параметрів електроду, але й через формування особливого стану його поверхні. Наявність наноструктурованих елементів, на відміну від звичайних і пористих електродів, завдяки специфіці їхньої будови сприяє суттєвій інтенсифікації електрохімічних окисно-відновних процесів.

Метою цієї роботи було дослідження окисно-відновного процесу лізину гідрохлориду на електродах із нікелевих гострійних структур, модифікованих наночастинками платини. Як основний метод обрано вольтамперометрію з лінійною та циклічною розгорткою потенціалу.

Такий вибір зумовлений широким застосуванням циклічної вольтамперометрії для вивчення редокс-процесів і реакцій, що супроводжуються перенесенням електронів. Отримані вольтамперометричні дані дають змогу оцінити стандартний потенціал, швидкість електронного перенесення, коефіцієнти дифузії та кінетичні параметри хімічних реакцій, що й становило основну мету цього дослідження [1].

Модифікацію електроду проводили шляхом простого електрохімічного осадження мікрокількостей платини на вершини гострійних структур, і досліджували його електрохімічні властивості. Модифікований електрод проявляв активність до окиснення лізину гідрохлориду після прикладання потенціалу, необхідного для окиснення деполаризатора [2].

Вольтамперометричні вимірювання проводили в трьохелектродній комірці, оснащений робочим електродом модифікованим мікрокількостями платини, допоміжним електродом Pt та електродом порівняння Ag|AgCl|насичений KCl.

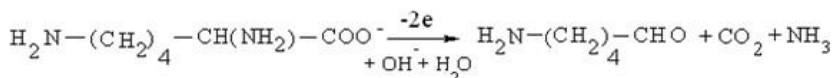
Для проведення електрохімічного окиснення лізину необхідно перевести молекулу лізину в стан з негативним зарядом, що можливо досягти лише в лужному середовищі. Максимальна швидкість розряду деполаризатора досягається при значенні $pH = 12$, подальше підвищення pH розчину не впливає на швидкість процесу в цілому. Тому, процес електроокиснення лізину досліджували на фоновому розчині натрій

перхлорату при pH = 12. Встановлено, що висота максимумів струму лінійно зростає зі збільшенням концентрації деполаризатора в розчині за практично незмінного значення потенціалу півхвилі ($E_{1/2} = 2,45\text{--}2,48$ В). Лінійний калібрувальний графік між струмом піку окиснення та концентрацією тирозину знаходився в діапазоні від $1 \cdot 10^{-2}$ до $5 \cdot 10^{-3}$ М з коефіцієнтом кореляції 0,997. Така залежність створює передумови для кількісного визначення лізину методами вольтамперометрії.

За значень pH ≥ 12 унаслідок адсорбції аніонів лізину відбувається витіснення молекул води з поверхні електрода, що, своєю чергою, уповільнює процес її електрохімічного розряду. Подібний ефект спостерігався і в наших дослідженнях: потенціал окиснення води зміщується у позитивну область і становить близько 3,0 В. Окиснення води сильно пригнічувалося адсорбцією амінокислот та подальшим окиснювальним розкладом. Адсорбція амінокислоти на електроді досягалася через кінцеву групу COO^- повністю непротонованих аніонів. Встановлено, що електроокиснення лізину на платині відбувається у лужному середовищі (pH = 12) необоротно. По-перше, на це вказує форма циклічної вольтамперометричної кривої, на катодних ділянках якої відсутні максимуми струму. По-друге, зміна швидкості накладання потенціалу в межах 0,02– 0,1 В/с веде до зростання перенапруги процесу на 750 мВ. Розрахований діагностичний критерій Семерано на фоні NaClO_4 – 0,62 [3].

Були визначені константа швидкості (K), коефіцієнт переносу електронів (α), коефіцієнт дифузії (D) та уявна енергія активації (ΔE_a) при електрокаталітичному окисненні амінокислот на фоні NaClO_4 , які склали: $2,4 \cdot 10^{-4} \text{ см} \cdot \text{с}^{-1}$; $0,43 \pm 0,03$; $9,4 \cdot 10^{-12} \text{ м}^2/\text{с}$ та 18,9 кДж/моль, відповідно. Отримані дані вказують, що швидкість процесу визначається дифузійною областю. Зростання температури на кожні 10 градусів в наших дослідженнях призводило до зростання пікових струмів максимумів на вольтамперометричних кривих в 1,7 – 1,75 разів.

Запропоновано механізм електроокиснення, який передбачає послідовне відщеплення електронів. Відрив першого електрону призводить до утворення стабільного інтермедіата з ентальпією утворення –361,8 кДж/моль.



Дуже низька межа виявлення та його висока чутливість дозволяють припустити, що модифікований електрод з наноструктурованої платини може діяти як електрохімічний датчик для визначення лізину гідрохлориду в реальних зразках.

Список використаних джерел

1. Kiran T. S., Hiremath D. C., Nandibewoor S. T. / Oxidation of L-lisine by diperiodatocuprate (III) in aqueous alkaline medium by tnestoppes flow technique. Biophysical Chemistry. V. 81. 2007. P. 2070–2077.
2. Мінаєв Б. П., Аксіментьєва О. І., Лут О. А. Шевченко О. П. / Електрохімічне окиснення тирозину в кислому середовищі. Питання хімії та хімічної технології. 2019. № 5. С. 77–83.
3. Ogura K., Kobayashi M., Nakayama M., Miho Y. / Electrochemical and insitu FTIR studies on the adsorption and oxidation of glycine and lysine in alkaline medium. Journal of Electroanalytical Chemistry. V. 449. Issues 1–2, 1998, P. 101–109.

ЗРОСТАННЯ ГУСТИНИ СТРУМУ ПРИ ДИФУЗІЙНО-КОНТРОЛЬОВАНІЙ СТАДІЇ АДСОРБЦІЇ НЕЙТРАЛЬНИХ МОЛЕКУЛ ІЗ ТОНКОГО ШАРУ НА ЕЛЕКТРОДІ З ГАРМОНІЧНОЮ ШЕРЕХАТИСТІЮ ПОВЕРХНІ

Ольга Гічан

Інститут хімії поверхні ім. О. О. Чуйка Національної Академії Наук України
вул. Олега Мудрака, 17, Київ 03164, Україна, e-mail: gichan@isc.gov.ua

Відомо, що шерехатість поверхні електрода може значною мірою впливати на різноманітні електрохімічні процеси [1–7]. Метою даного дослідження є встановлення впливу плавної гармонічної шерехатості поверхні електрода на густину струму при дифузійно-контрольованій адсорбції нейтральних молекул із дифузійного шару Нернста з безрозмірною товщиною $\Delta = d / L$. У рамках теорії збурень запропоновано теоретичну модель для опису стадії дифузійно-контрольованій адсорбції на шерехатому електроді. У моделі введено безрозмірний параметр збурення $\mu = h / L$, що дорівнював відношенню амплітуди осциляцій поверхні до періоду шерехатості поверхні. Проаналізовано отриманий аналітичний вираз для густини струму на одиницю довжини профілю гармонічної шерехатої поверхні, обмежуючись членами другого порядку малості $O(\mu^2)$. Проведено порівняння результатів для гладкої та шерехатої поверхні електрода. Показано, що шерехатість поверхні електрода веде до зростання густини струму (Рис. 1).

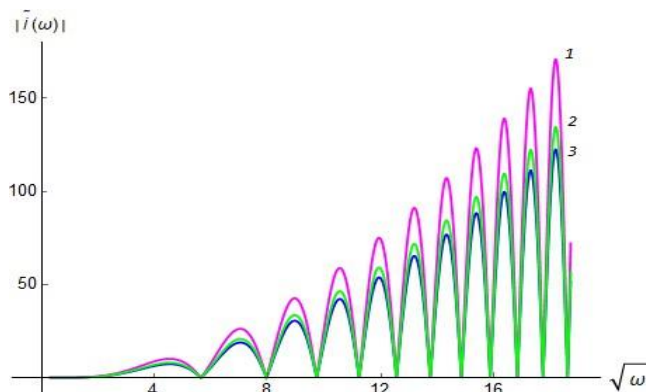


Рис. 1. Частотна залежність абсолютного значення густини струму $i(\omega)$ на одиницю довжини профілю гармонічної шерехатої поверхні електрода для таких значень безрозмірного параметра збурень μ : (1) 0,2; (2) 0,1; (3) 0.

Значеннями інших параметрів були: $E_0 = 50 \text{ mV}$; $\tau = 0,1 \text{ s}$; $\Delta = 0,5$;

$\alpha = 9 \cdot 10^{-4} \text{ V}^{-1}$; $\beta = 0,12$; $\gamma = 7 \text{ S}$; $\delta = 1,6 \cdot 10^3 \text{ A}$; $c_0 = 0,1 \text{ mol/m}^3$

Встановлено також вплив на густину струму при дифузійно-контрольованій адсорбції нейтральних молекул із приелектродного шару інших параметрів системи, а саме показано, що густина струму є чутливою до: швидкості зміни поверхневої густини частинок адсорбованих на електроді (величини адсорбції Γ) зі зміною потенціала електрода при фіксованій концентрації частинок, що адсорбуються, $\alpha = \frac{1}{c_0 L} \left(\frac{\partial \Gamma}{\partial E} \right)_C$; швидкості зміни величини адсорбції зі зміною концентрації частинок, що адсорбуються при фіксованому потенціалі електрода, $\beta = \frac{1}{L} \left(\frac{\partial \Gamma}{\partial C} \right)_E$; швидкості зміни заряду електрода зі зміною поверхневої густини частинок адсорбованих на електроді при фіксованому потенціалі електрода, $\delta = \left(\frac{\partial q}{\partial \Gamma} \right)_E \frac{D}{L} c_0$ (D – коефіцієнт дифузії частинок, що адсорбуються); ємності подвійного шару, $\gamma = C_{dl} \frac{D}{L^2}$; об'ємної концентрації частинок, що адсорбуються, c_0 .

Список використаних джерел

1. Prerna, P. Kumar, R. Kant *Electrochim. Acta*, 2026, 545, 147734.
2. R. Rodrigo, J. Bonastre, J. Molina, F. Cases, *J. Electroanal. Chem.*, 2026, 1000, 119563.
3. R. M. Alhuthli, F. A. Alrahmany, A.B.A. Jahdaly. *Results in Chemistry*, 2026, 20, 103004.
4. A. U. Amrenova, A. M. Zhukeshov, U. B. Abdybai, Ye. E. Salimov, B. M. Useinov. *Discover Materials*, 2025, 5, 91.
5. Y. Tanaka, K. Kikuchi, *Results in Chemistry*, 2023, 5, 100984.
6. S. Torabi M., Cherry E. A., Duijnste V.M.L., Corre L., Qiu J.C., Hummelen G., Palasantzas L.J.A., Koster, *ACS Appl. Mater. Interfaces*, 2017, 9, 27290.
7. O. I. Gichan, Him. Fiz. Technol. Poverhni., 2025, 16, 486.

СЕКЦІЯ 4. АНАЛІТИЧНІ МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ У ВИРІШЕННІ ЕКОЛОГІЧНИХ ПРОБЛЕМ

MACHINE-LEARNING CLASSIFICATION OF PHARMACEUTICAL QUALITY- CONTROL EVENTS: THE LIMITS OF COMPOUND DATA INTERVENTIONS

Mykola Vizir¹, Ruslan Vizir², Dmytro Vizir³

¹ Quality Control, Aurobindo Pharma USA, Inc., vizirn@gmail.com

² Quality Assurance, MedPharm USA, vizirr25@gmail.com

³ Academy of Information Technology program, Apex High School, USA,
e-mail: dimviz2009@gmail.com

Analytical quality control in pharmaceutical manufacturing generates a continuous stream of test results that must be classified and acted upon under strict regulatory timelines (FDA 21 CFR Part 211; ICH Q9). Each result of an analytical procedure – assay by HPLC, dissolution, water content by Karl Fischer titration, particulate matter, sterility – must be categorized as in-specification, out-of-specification (OOS), or out-of-trend (OOT), and, where a deviation or data-integrity concern arises, escalated for investigation. This classification is grounded in both chemistry and regulatory judgment: it requires interpreting an analytical measurement against its specification limit, recognizing trends across batches, and assessing the severity of the chemical or microbiological finding. Performed manually by analytical scientists and quality-assurance personnel, the task is laborious and prone to inter-analyst variability. We investigate whether a fine-tuned large language model (LLM) can perform this analytical-result classification, and we report a methodological finding of broad relevance to data-driven approaches in chemistry.

We constructed a benchmark of 13,823 quality-event records (12,069 training, 916 validation, 838 test) synthesized from publicly available FDA enforcement actions (Warning Letters and Form 483 inspection observations, 2020–2024) through a three-model generation pipeline with cross-audit. Each record describes an analytical event – for example, a particulate-matter result of 1500 per container against a specification of < 600, or a dissolution profile outside acceptance criteria – and is labeled with one of seven case types (OOS, OOT, Data Integrity, Deviation, Investigate, In-Specification, unknown) and a severity grade. A Llama-3.2-11B-Vision-Instruct [4] model was fine-tuned by Low-Rank Adaptation (LoRA) [3] and evaluated against seven production criteria, including classification accuracy, severity accuracy, and a critical-miss rate bounding the misclassification of safety-critical results.

The baseline configuration achieved a case-type accuracy of 0.760 and a macro-averaged F1 of 0.612 on the held-out test set, rising to 0.790 and 0.736 respectively under an inference-time confidence threshold that recovers an abstention class for ambiguous results [5] (95% bootstrap confidence intervals computed by 10,000-fold resampling [7]). Against an untrained base-model reference (macro-F1 = 0.490), the fine-tuned model delivered a statistically significant improvement of +0.122 (95% CI [+0.094, +0.149]).

We then attempted to improve the baseline by simultaneously applying eight data-quality interventions — removing lexical shortcuts [6], consolidating the analytical-subtype taxonomy, and rebalancing rare classes – in a single training iteration. Counterintuitively, every classification metric regressed: macro-F1 fell to 0.483 and case-type accuracy to 0.609. A paired-bootstrap analysis established that the resulting model was statistically indistinguishable from the untrained base model (Δ macro-F1 = -0.007 , 95% CI [-0.032 , $+0.018$]); the compound

intervention eliminated the primary classification advantage of fine-tuning. The dominant failure mode was a “magnet” effect, in which the model collapsed uncertain results onto a single dominant class (the OOT category absorbed predictions at $2.6\times$ its true frequency), together with the collapse of the confidence separation required for threshold-based abstention.

The principal conclusion is methodological and transferable to computational chemistry generally: when multiple individually reasonable data-quality interventions are combined in a single step, their effects can interact non-additively and produce regressions that no individual intervention would predict, while leaving structural quality indicators (parsing, schema, output format) apparently intact.

A subsequent partially isolated ablation targeting a single intervention recovered significantly above the failed compound model, supporting the conclusion that the collapse was not attributable to that intervention alone. Post-evaluation audit further identified lexical class-word anchoring – rather than identifier leakage – as the dominant residual shortcut. The same audit revealed an unintended learning-rate mismatch, illustrating how difficult clean single-variable attribution is in practice.

We therefore argue that data-centric model development [8] in regulated analytical domains should proceed through mechanically verified sequential single-variable ablations with pre-registered acceptance criteria and validated training configurations, and that comparison against an untrained baseline should be treated as a routine diagnostic for distinguishing ordinary regression from the effective loss of learned domain behavior.

References

1. U.S. Food and Drug Administration, 21 CFR Part 211: Current Good Manufacturing Practice for Finished Pharmaceuticals.
2. International Council for Harmonisation, ICH Q9 (R1): Quality Risk Management, 2023.
3. E. J. Hu, Y. Shen, P. Wallis, et al., LoRA: Low-Rank Adaptation of Large Language Models, Int. Conf. Learn. Represent. (ICLR), 2022.
4. Meta AI, Llama 3.2: Multimodal Large Language Models, 2024.
5. Y. Geifman, R. El-Yaniv, Selective Classification for Deep Neural Networks, NeurIPS 2017.
6. S. Kapoor, A. Narayanan, Leakage and the Reproducibility Crisis in ML-based Science, Patterns, 2023, 4, 100804.
7. B. Efron, R. J. Tibshirani, An Introduction to the Bootstrap, Chapman & Hall, 1993.
8. A. Ng, A Chat with Andrew on MLOps: From Model-Centric to Data-Centric AI, DeepLearning.AI, 2021.

МОНІТОРИНГ ВМІСТУ НІТРАТІВ У ХАРЧОВИХ ПРОДУКТАХ АНАЛІТИЧНИМИ МЕТОДАМИ

Діана Загребельна

Уманський національний університет

e-mail: zagrebelna2506@gmail.com

В умовах сучасного розвитку сільського господарства та інтенсивного використання мінеральних добрив проблема накопичення нітратів у харчових продуктах набуває особливої актуальності. Надмірний вміст нітратів у овочах, фруктах та інших продуктах харчування може негативно впливати на здоров'я людини, спричиняючи порушення обміну речовин, кисневе голодування організму та інші токсичні ефекти. Особливо

небезпечними є продукти з перевищенням гранично допустимих концентрацій нітратів, що робить необхідним постійний контроль їх вмісту.

Важливу роль у забезпеченні якості та безпечності харчових продуктів відіграють аналітичні методи дослідження. Сучасні методи аналізу дають можливість швидко, точно та ефективно визначати концентрацію нітратів у різних харчових продуктах. Серед найбільш поширених методів використовують спектрофотометричний, потенціометричний методи, а також експрес-аналіз за допомогою нітратомірів.

Нітрати – це солі нітратної кислоти, які є природними компонентами ґрунту та необхідними елементами живлення рослин. Основним джерелом надходження нітратів у рослинну продукцію є азотні мінеральні добрива, що широко використовуються у сільському господарстві для підвищення врожайності. Проте надмірне внесення добрив, порушення умов вирощування та зберігання продукції можуть призводити до накопичення значної кількості нітратів у харчових продуктах.

Найбільше нітратів здатні накопичувати листові овочі, буряк, редис, огірки, капуста та баштанні культури. Рівень вмісту нітратів залежить від виду рослини, умов вирощування, освітлення, вологості та сезону. Потрапляючи до організму людини, нітрати можуть перетворюватися на нітрити – токсичні сполуки, які негативно впливають на кровоносну систему та загальний стан організму.

Для контролю безпечності харчових продуктів встановлено гранично допустимі концентрації нітратів. Їх дотримання є важливим елементом санітарно-гігієнічного контролю та екологічного моніторингу. Саме тому особливого значення набуває використання сучасних аналітичних методів дослідження, які забезпечують точне визначення вмісту нітратів у продуктах харчування.

Серед основних методів визначення нітратів використовують спектрофотометричний, потенціометричний та експрес-методи аналізу. Вони дають можливість оперативно оцінити якість продукції та виявити можливі перевищення допустимих норм.

Визначення вмісту нітратів у харчових продуктах здійснюється за допомогою різних аналітичних методів, які відрізняються точністю, швидкістю виконання та складністю обладнання. Вибір методу залежить від мети дослідження, типу зразка та необхідної достовірності результатів.

Одним із найпоширеніших є спектрофотометричний метод, який ґрунтується на вимірюванні поглинання світла розчинами, що містять нітрати або продукти їх реакцій. Після попередньої підготовки зразка та проведення хімічних реакцій утворюється забарвлена сполука, інтенсивність якої пропорційна концентрації нітратів. Цей метод відзначається високою точністю та використовується в лабораторних умовах.

Потенціометричний метод базується на вимірюванні електричного потенціалу іон-селективного електрода, чутливого до нітрат-іонів. Він дозволяє швидко визначати концентрацію нітратів без складної пробопідготовки та є зручним для експрес-аналізу.

Також широко застосовуються експрес-методи, зокрема використання портативних нітратомірів. Вони дозволяють оперативно оцінити рівень нітратів безпосередньо в польових умовах або в торгових точках, що є важливим для швидкого контролю якості продукції.

Окрім цього, у наукових дослідженнях використовують хроматографічні методи, які забезпечують високу точність і дають можливість одночасного визначення кількох іонів

та домішок у складних зразках. І, таким чином, сучасні аналітичні методи дозволяють ефективно здійснювати контроль вмісту нітратів у харчових продуктах і є важливим інструментом у системі екологічного та санітарного моніторингу.

Практична частина роботи передбачає проведення аналізу вмісту нітратів у різних харчових продуктах із використанням доступних аналітичних методів та подальшу оцінку отриманих результатів.

На першому етапі здійснюється відбір зразків. Для дослідження обираються найбільш поширені продукти рослинного походження, які потенційно можуть накопичувати нітрати (наприклад: огірки, капуста, буряк, морква, салат, редис). Зразки беруться з різних джерел – ринок, супермаркет або домашнє господарство – для порівняння.

Другий етап включає підготовку проб до аналізу. Зразки подрібнюють, віджимають сік або готують водні витяжки, які фільтрують для отримання прозорого розчину, придатного для вимірювання.

Далі проводиться визначення вмісту нітратів за допомогою обраного методу (найчастіше – нітратоміра або спектрофотометричного аналізу). Отримані значення фіксуються для кожного зразка у відповідних одиницях вимірювання (мг/кг або мг/л).

Після цього здійснюється обробка результатів: дані систематизуються у вигляді таблиці, порівнюються між собою та з гранично допустимими концентраціями нітратів, встановленими санітарними нормами.

На завершальному етапі робиться аналіз отриманих даних, визначаються зразки з підвищеним вмістом нітратів, а також можливі причини таких результатів (умови вирощування, сезонність, походження продукції).

У ході проведеного дослідження було визначено вміст нітратів у зразках харчових продуктів рослинного походження за допомогою аналітичних методів. Отримані результати дозволили оцінити рівень нітратного навантаження у різних видах продукції та порівняти його з гранично допустимими концентраціями.

Аналіз показав, що найвищий вміст нітратів спостерігався у листових овочах (салат, капуста) та коренеплодах (буряк, редис). Це узгоджується з теоретичними даними про здатність цих культур активно накопичувати нітрати. У таких зразках іноді фіксувалися значення, близькі до верхньої межі допустимих норм або такі, що її перевищували.

Натомість у плодах (огірки, морква) рівень нітратів був відносно нижчим і здебільшого не перевищував нормативні показники. Це свідчить про залежність накопичення нітратів від біологічних особливостей рослин та умов їх вирощування.

Порівняння отриманих даних із встановленими санітарними нормами показало, що більшість досліджених зразків є безпечними для споживання, однак окремі випадки підвищеного вмісту нітратів потребують уваги та додаткового контролю.

Отримані результати підкреслюють важливість регулярного моніторингу харчових продуктів, оскільки навіть у межах одного виду продукції рівень нітратів може суттєво коливатися. Це залежить від умов вирощування, використання добрив, сезонності та місця походження продукції.

У даній тезі розглянуто проблему вмісту нітратів у харчових продуктах та значення їх контролю для забезпечення харчової безпеки населення. Встановлено, що надмірне накопичення нітратів пов'язане з умовами вирощування рослин і використанням азотних добрив, а найбільш чутливими до їх накопичення є листові овочі та коренеплоди.

Проаналізовано основні аналітичні методи визначення нітратів, зокрема спектрофотометричний, потенціометричний та експрес-методи, які дозволяють ефективно здійснювати моніторинг якості харчових продуктів.

Практична частина підтвердила, що рівень нітратів у продуктах може суттєво варіюватися, однак у більшості випадків не перевищує допустимих норм. Отримані результати підкреслюють важливість регулярного контролю та застосування сучасних аналітичних методів для своєчасного виявлення потенційно небезпечної продукції.

Таким чином, аналітичний моніторинг вмісту нітратів є важливим елементом екологічного та санітарного контролю, спрямованого на збереження здоров'я населення.

Список використаних джерел

1. Гігієна та екологія харчування : навчальний посібник / за ред. В. І. Ципріяна. Київ : Медицина, 2016. 528 с.
2. Аналітична хімія : підручник / О. Д. Трочинський, Л. П. Григор'єва. Харків : ХНУ імені В. Н. Каразіна, 2018. 412 с.
3. Екологічна хімія : навчальний посібник / С. М. Литвиненко, І. В. Савчук. Львів : ЛНУ імені Івана Франка, 2017. 376 с.

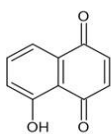
СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧНЕ ДОСЛІДЖЕННЯ ГІДРОЗОЛІВ СРІБЛА НА ОСНОВІ ЕКСТРАКТІВ З ОПЛОДНЯ ГОРІХА ВОЛОСЬКОГО

Валентина Литвин, Маркета Пробін

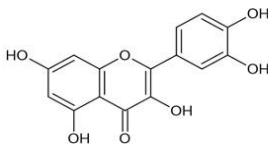
Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького

e-mail: probin.marketa2222@vu.edu.ua

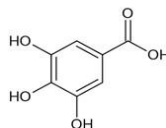
Горіх волоський *Juglans regia* L. плодове дерево, що досягає висоти до 25 метрів. Поширений на всій території України. Органи горіха містять речовини фенольної природи, які здатні відновлювати іони металів, зокрема Ag^+ . Прикладами таких речовин можуть бути:



Юглон



Кверцетин



Галова кислота

Результатом такого відновлення, за певного складу реакційної суміші та відповідних умов, може бути утворення гідрозолу, що містить наночастинки срібла. Фенольні сполуки легко екстрагуються лужними розчинами, але такі екстракти будуть змінюватися під час зберігання, тому що мономерні фенольні сполуки можуть окиснюватися киснем. Тому такі речовини потребують попередньої конденсації для їх стабілізації [1]. Після стабілізації ці сполуки вжене реагують з киснем, але зберігають свою відновну здатність щодо іонів срібла. Тому першим нашим методом виділення відновників з оплодня горіха була лужна екстракція з окисненням молекулярним киснем. За цим методом подрібнений матеріал масою 130 грамів вміщували до реакційної колби, додавали 80 cm^3 1,0 М розчину NaOH і 120 cm^3 дистильованої води, колбу продували чистим киснем і механічно

струшували протягом 10 годин. За цей час у реакцію вступило близько 500 см^3 кисню і його споживання припинилося, що вказувало на закінчення окиснення. На основі цього екстракту було успішно одержано срібний гідрозоль. Але недоліком такого екстракту є те, що при його одержанні з відновниками переходить багато сторонніх речовин, а також він містить надлишок лугу, який в даному випадку є баластною речовиною.



Рис. 1. Етапи приготування лужного екстракту перикарпії горіха
а – подрібнення; б – завантаження в колбу; в, г – заливка розчином лугу

У другому способі екстракцію проводили послідовно органічним розчинником ацетонітрилом [2] та водно-спиртовою сумішшю. З подрібненого матеріалу екстрагували відновлюючі сполуки. Після випарювання ацетонітрилу твердий залишок являв собою важкоподрібнювану масу нерозчинну у етанолі, але ця маса легко розчинилася у водно-спиртовій суміші.

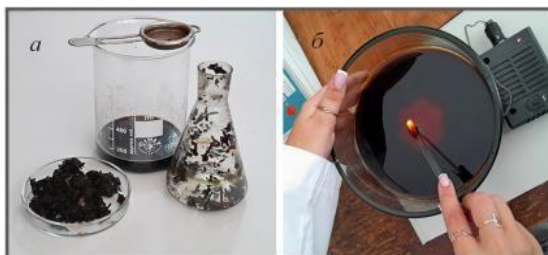
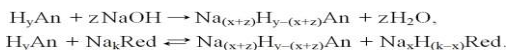


Рис. 2. Приготування водно-спиртового екстракту

Для приготування ацетонітрильного екстракту [2] у колбу на 200 см^3 з притертою пробкою було взято 50 г подрібненого оплоддя і залито 100 см^3 ацетонітрилу. Суміш залишили настоюватися протягом однієї доби. Під час настоювання суміш збовтували кілька разів. Одержаний екстракт вилили в кристалізатор і залишили для випарювання екстрагенту за кімнатної температури у витяжній шафі. Для видалення залишкової вологи екстракт досушували у сушильній шафі при температурі 80°C . Висушений екстракт являв собою тверду, гігроскопічну масу, яку було важко відділити від кристалізатора. Добрим розчинником для цієї маси виявилася суміш вода-етанол, в об'ємному співвідношенні 1:1.

Після повного розчинення твердих речовин у кристалізаторі водно-спиртовий екстракт фільтрували через паперовий фільтр і зберігали у скляній тарі. При зберіганні протягом трьох місяців візуально не спостерігалось жодних змін виготовленого екстракту.

У третьому способі для виділення відновників з лужного екстракту було застосовано метод іонного обміну. В процесі одержання цього екстракту для прискорення реакції було використано значний надлишок лугу, який в даному випадку є баластною речовиною. Реакція іонного обміну проводилась при рН-метричному контролі процесу. Суть катіонообмінного процесу полягає в обміні катіонів Na^+ із солеподібних продуктів Na_kRed та надлишку лугу NaOH в екстракті з катіонами H^+ іонообмінної смоли H_yAn , здатними до обміну:



де An – нерозчинний макроаніон іонообмінної смоли, а $y \gg k + z$.

До 50 см^3 екстракту з $\text{pH} = 12,6$ при перемішуванні додавали невеликими порціями катіонообмінну смолу КУ-2-8 в Н-формі, кожного разу очікуючи стабілізації рН.



Рис. 3. Стадії виділення суми відновників з лужного екстракту
а – вихідний екстракт; б – додавання катіоніту при рН-метричному контролі;
в – відфільтрований катіоніт; г – фільтрування через паперовий фільтр

Процес проводили до досягнення нейтрального середовища в розчині і відділяли катіоніт на фільтрі Шотта, після чого екстракт додатково фільтрували через паперовий фільтр. Масову концентрацію сухої речовини в одержаному екстракті встановлювали випарюванням 5 см^3 його і зважуванням сухого залишку. Кислотно-основні властивості одержаних екстрактів були охарактеризовані за методом рК-спектроскопії [3].

Срібні гідрозолі синтезували за методикою, описаною в роботі [4]. Спектри гідрозолів, одержані з використанням трьох описаних вище горіхових екстрактів, знімали на спектрофотометрі СФ-26 у кварцовій кюветі з довжиною оптичного шляху 1 см . Одержані спектральні залежності наведено на рис. 4.

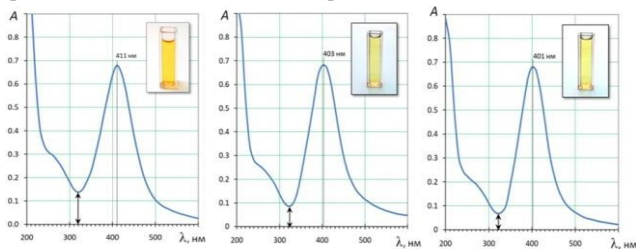


Рис. 4. Нормовані спектри поглинання гідрозолів,
одержаних з трьох екстрактів

Довжина хвилі, при якій знаходиться максимум поглинання характеризує середній розмір наночастинок. Порівнюючи положення максимумів поглинання, можемо зробити висновок, що середній розмір наночастинок у цих гідрозолях відрізняється мало. Загалом

він зменшується зі збільшенням порядкового номера спектру. Ширина максимуму поглинання на половині висоти характеризує полідисперсність гідрозолу. Цей показник зменшується від гідрозолу, одержаного з неочищеного екстракту до гідрозолу, одержаного з використанням екстракту, обробленого катіонітом.

Відстань від точки мінімуму спектральної кривої до осі довжин хвиль вказує на присутність органічних сполук, що не прореагували. Згідно з вище зазначеними критеріями гідрозоль, одержаний з екстракту, що пройшов катіонообмінну обробку, мав найкращі властивості.

Список використаних джерел

1. Litvin V. A., Galagan R. L., Minaev B. F. Kinetic and mechanism formation of silver nanoparticles coated by synthetic humic substances. *Coll. & Surf.*, V. 414, 2012, 234 – 243.
2. Al-Nadaf A., Awadallah A., Thiab S. Superior rat wound-healing activity of green synthesized silver nanoparticles from acetonitrile extract of *Juglans regia* L: Pellicle and leaves. *Heliyon*, V. 10, 2024, e 24473.
3. Anorganikum. Lehr- und Praktikumsbuch der anorganischen Chemie. Von Autorenkollektiv. Herausgegeben von Lotar Kolditz. In 2 Teilen. Teil 2, Berlin, 1984, 656 s.
4. Abbasi Z., Feizi S., Taghipour E., Ghadam P. Green synthesis of silver nanoparticles using aqueous extract of dried *Juglans regia* green husk and examination of its biological properties. *reen Proc. Synt.*, 2017, № 6, 477–485.

ІДЕНТИФІКАЦІЯ БАРВНИКА E110 «ЖОВТИЙ СОНЯЧНИЙ ЗАХІД» У БЕЗАЛКОГОЛЬНОМУ НАПОЇ МЕТОДОМ ТОНКОШАРОВОЇ ХРОМАТОГРАФІЇ

Антон Беляєв¹, Владислав Тарадайка¹, Юлія Шафорост¹, В'ячеслав Пасічник²

¹Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького

²Черкаський науково-дослідний експертно-криміналістичний центр МВС України
e-mail: anton2007newernut@gmail.com

Сучасну харчову промисловість неможливо уявити без використання синтетичних або природних добавок, що надають продукту привабливого вигляду. Значну частку таких сполук становлять саме синтетичні барвники. Їхнє використання зумовлено хімічною стійкістю та економічною доцільністю. Проте використання штучних барвників потребує суворого контролю через їхню потенційну небезпеку для здоров'я людини. Одним із найбільш поширених синтетичних барвників, який масово додають до безалкогольних напоїв і кондитерських виробів, є «Жовтий сонячний захід», відомий за кодом E110. Надмірне надходження цієї речовини до організму здатне провокувати алергічні реакції у гіперчутливих осіб. З огляду на те, що окремі виробники вдаються до фальсифікації складу та приховують наявність барвника на маркуванні, його достовірна ідентифікація у харчових продуктах є вкрай актуальним завданням [1]. Метою роботи є якісне визначення E110 в безалкогольному напої «БонБуасон Манго» методом тонкошарової хроматографії, порівняльна оцінка систем елюентів та оптимізація методики.

Барвник «Жовтий захід сонця» — це синтетична органічна сполука, що належить до класу азобарвників. Ключовою структурною особливістю цієї речовини є наявність азогрупи ($-N=N-$), яка з'єднує два ароматичні кільця. Саме ця структурна властивість зумовлює інтенсивне жовто-помаранчеве забарвлення сполуки. На рис. 1 наведено структурну формулу барвника «Жовтий сонячний захід».

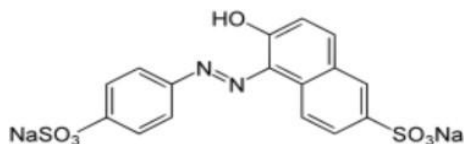


Рис. 1. Структурна формула барвника E110

Цей азобарвник не має характерної крапельної якісної реакції, тому його визначення є утрудненим. Дослідження проводили за методом тонкошарової хроматографії. Цей метод базується на вибіркового сорбуванні та десорбуванні речовини під час проходження фронту розчинника крізь шар сорбенту. Різні речовини мають різну швидкість процесів сорбції та десорбції, тому переміщуються по пластині з різною швидкістю. Для кожної речовини в певній системі розчинників ця висота є унікальною. Для ідентифікації речовини використовують R_f (Retention Factor або фактор утримування) – це безрозмірна величина, яка показує відношення відстані, яку пройшла речовина на пластинці, до відстані, яку пройшов розчинник.

Для проведення якісного аналізу вмісту барвника у безалкогольному напої відібрали 20 см³ напою, перенесли в мірну колбу на 100 см³ та довели об'єм до мітки. Далі провели попереднє відділення барвника від інших компонентів. Для цього в 20 см³ аналізованого розчину додали 10 см³ бутан-1-олу та кристалічного (NH₄)₂SO₄ до насичення нижнього шару розчину [2]. Спостерігали перехід забарвленої фази із нижнього шару у верхній. На попередньо підготовлену пластину за допомогою капіляра нанесли 1–2 краплі досліджуваного екстракту та стандарту (0,1 мг/см³). Для дослідження використовували пластини «Merck TLC Silicagel 60 F₂₅₄». Хроматографування проводили з використанням двох елюентних систем: бутан-1-ол : льодяна етанова кислота : вода (5:2,5:3) [3]; бутан-1-ол : етанол : 25 % амоніак : вода (1:2:0,1:1). Час проведення – близько 1,5 години; довжина пробігу – 9,6 см. Оскільки E110 забарвлена речовина, ідентифікація хроматографічних зон за допомогою специфічних реагентів не проводилася.

Оригінальну методику, описану в джерелі [3], було дещо модифіковано. Зокрема, було замінено ізобутанол на бутан-1-ол, оскільки їхня розчинювальна здатність щодо барвника є співставною. Це зумовлено економічною недоцільністю використання ізобутанолу через його порівняно високу вартість, а також його значною леткістю, що ускладнює практичне проведення експерименту.

Орієнтовні значення хроматографічної рухливості (R_f) для пластин «Merck TLC Silicagel 60 F₂₅₄» наведені в таблиці.

Таблиця 1.

Значення R_f для барвника E110

Назва розчину	Забарвлення зон	Значення R_f	
		Система № 1	Система № 2
Стандарт E110	Помаранчеве	0,67	0,69
Екстракт із напою	Помаранчеве	0,65	0,69

Незначна розбіжність у значенні R_f може пояснюватися, що при екстракції з напою разом з барвником можуть екстрагуватися інші органічні речовини, які можуть заважати визначенню.

Проаналізувавши зазначені вище хроматограми, можна дійти висновку, що система № 2 є більш придатною для ідентифікації E110 у харчових продуктах ніж система № 1.

Отримані результати свідчать про ефективність системи бутан-1-ол–станол–амоніак–вода для ідентифікації барвника E110 у харчових продуктах. Значення R_f для стандарту та досліджуваного екстракту практично збігаються, а хроматографічні зони є чіткими та добре відтвореними.

Список використаних джерел

1. Закон України «Про державний контроль у сфері безпечності харчових продуктів» [Електронний ресурс]. – Режим доступу: <https://zakon.rada.gov.ua/go/z0556-99> (дата звернення: 29.05.2026).

2. Дмухайло А. В., Король Р. О., Рибак В. І., Ридчук П. В., Дубенська Л. О. Стаціонарні електроди на основі твердої амальгами срібла для вольтамперометричного визначення синтетичного харчового барвника жовтий «захід сонця» у напоях та ліках. *Methods and Objects of Chemical Analysis*. 2025. Vol. 20, №1. Р. 5–14.

3. Козакова Н. О., Яценко І. В., Буй О. Д., Гамуля О. В. Виявлення синтетичних барвників в ікрі лососевих риб методом тонкошарової хроматографії. *Вісник Сумського національного аграрного університету. Серія «Ветеринарна медицина»*. 2025. № 3 (70). С. 41–46.

КІНЕТИЧНА СТАБІЛЬНІСТЬ КОМПЛЕКСОУТВОРЕННЯ d-МЕТАЛІВ ІЗ ЦИКЛІЧНИМИ ЛІГАНДАМИ, ІММОБІЛІЗОВАНИМИ НА ПОВЕРХНІ СИЛІКАГЕЛЮ

Олександр Корженівський, Ігор Левандовський

Національний технічний університет України

Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського

e-mail: sashakorzh2001@gmail.com

В останні роки значний інтерес дослідників прикутий до модифікованих кремнеземів, які виступають основою для створення високоєфективних матеріалів, здатних до селективного вилучення та концентрування іонів d-металів. Використання циклічних лігандів, таких як краун-естери, азо-макроцикли та їх похідні, ковалентно закріплених на поверхні силікагелю, дозволяє створювати сорбційні системи з унікальними властивостями [3]. Однак для успішного впровадження таких матеріалів необхідно детально вивчити термодинамічні параметри комплексоутворення та кінетичну стабільність систем, що формуються на межі поділу фаз тверде тіло – розчин. Процес формування комплексів на поверхні силікагелю суттєво відрізняється від реакцій у гомогенному середовищі [1]. Нерухомість ліганду, жорстко закріпленого на носії, обмежує його конформаційну рухливість, що призводить до виникнення значних просторових перешкод. Стабільність таких поверхневих комплексів залежить від геометричної відповідності порожнини макроциклу розмірам іона металу, а також від можливості ліганду підлаштуватися під конкретний координаційний вузол без надмірного деформування всієї молекулярної структури [2]. Ентальпія деформації циклічної структури при переході з вільного стану у стан, зв'язаний з поверхнею, відіграє вирішальну роль у загальній термодинамічній стійкості. Кінетична стійкість поверхневих сполук визначається швидкістю процесу дисоціації комплексу, тобто виходом іона металу за межі лігандного оточення [3]. У випадку ковалентно іммобілізованих циклічних систем спостерігається яскраво виражений ефект затиснення катіону металу в середину циклу.

Після координації катіон металу виявляється заблокованим усередині макроциклу, який жорстко зафіксований на поверхні носія. Висока концентрація функціональних груп робить додаткові стеричні ефекти, які значно ускладнюють дифузію іонів металів углиб шару сорбенту та їх вихід з нього [2]. Така структура матеріалу сприяє збільшенню енергії активації процесу дисоціації, роблячи поверхневі комплекси більш стабільними до впливу зовнішнього середовища. Експериментальні дослідження підтверджують, що ковалентне закріплення через силанольні групи забезпечує високу хімічну стійкість комплексів у широкому діапазоні значень рН, зазвичай від кислих до слаболужних середовищ. Це перевага перед системами, де ліганд лише фізично адсорбований на носії, оскільки ковалентний зв'язок запобігає вимиванню або десорбції ліганду, забезпечуючи стабільну роботу сорбенту протягом тривалого часу та багатьох циклів регенерації [2].

Список використаних джерел

1. Zeinab Ezzeddine, Isabelle Batonneau-Gener, Ghassan Ghssein, Yannick Pouilloux, *Recent Advances in Heavy Metal Adsorption via Organically Modified Mesoporous Silica: A Review*, *Water*, 2025, 17(5), 669.
2. G. A. Umirova, Kh. Kh. Turaev, Y. A. Geldiev, J. M. Khaitova, M. G. Yulchieva, A. E. Toshtemirov, Kh. Kulbasheva, *A review: Synthesis of chelate-forming polymer ligands and their coordination compounds with d-metals*, *Chemical Review and Letters*, 2025, 8(4)4, 673-690.
3. Smadar Attia, Alexander I Shames, Israel Zilbermann, Gil Goobes, *Covalent binding of a nickel macrocyclic complex to a silica support: Towards an electron exchange column*, *Dalton Transactions*. 2013, 43(1), 103-110.

ВИЗНАЧЕННЯ ХАРЧОВОГО БАРВНИКА E110 У ГАЗОВАНОМУ НАПОЇ «MIRINDA ORANGE» СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧНИМ МЕТОДОМ Юлія Шафорост, Олена Новікова

Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького
e-mail: zdoryulia@ukr.net; e-mail: novikova.olena2221@vu.cdu.edu.ua

Синтетичні харчові барвники широко застосовуються у виробництві безалкогольних напоїв, кондитерських виробів та інших продуктів харчування. Одним із найбільш поширених представників цієї групи є барвник E110 («Сонячний захід», Sunset Yellow FCF), який належить до класу азобарвників [1]. Завдяки високій інтенсивності забарвлення, добрій розчинності у воді та стійкості до дії температури його використовують для надання продуктам жовто-помаранчевого кольору. Найчастіше E110 входить до складу газованих напоїв, желейних десертів, мармеладу, морозива та сухих концентратів напоїв.

Разом із технологічними перевагами барвник E110 привертає увагу дослідників через можливий вплив на організм людини [2, 3]. За даними Європейського агентства з безпеки харчових продуктів (EFSA), надмірне споживання синтетичних азобарвників може спричиняти алергічні реакції та негативно впливати на поведінку дітей [4].

Контроль вмісту синтетичних барвників у харчових продуктах відповідно до чинного законодавства покладається на виробника, проте фактичний вміст таких добавок у готовій продукції може відрізнятися від заявленого. У зв'язку з цим важливого значення набуває

аналітичний моніторинг реальних зразків харчових продуктів. Тому визначення та контроль вмісту барвника E110 є актуальним завданням сучасної аналітичної хімії.

Метою роботи було визначення вмісту харчового барвника E110 у газованому напої «Mirinda Orange» методом сорбційно-спектрофотометричного аналізу.

Для проведення дослідження використовували спектрофотометр UV-1200 та стандартний зразок барвника E110. Визначення виконували за допомогою сорбційно-спектрофотометричної методики, яка ґрунтується на здатності аніонної форми барвника адсорбуватися на поверхні активованого оксиду алюмінію з подальшою десорбцією у лужному середовищі.

Для побудови градуувального графіка готували серію стандартних розчинів барвника E110 з концентраціями від 0,58 до 8,70 мг/дм³. Після проведення сорбції та десорбції вимірювали оптичну густину отриманих розчинів у видимій області спектра. Попередньо було встановлено, що максимум світлопоглинання барвника E110 знаходиться при довжині хвилі 480 нм (рис.). Саме за цієї довжини хвилі здійснювали всі подальші вимірювання.

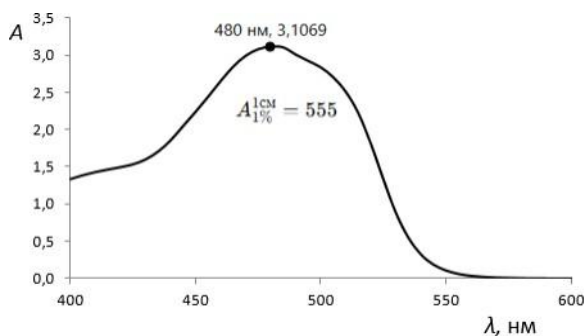


Рис. Спектр поглинання барвника E110 у фосфатному буферному розчині (рН = 7,0)

За літературними даними [5], барвник E110 характеризується максимумом світлопоглинання при $\lambda_{\text{max}} = 485$ нм, а питомий коефіцієнт поглинання становить 555 дм³/г·см. Як показали результати нашого дослідження (рис.), максимум поглинання розчину барвника E110, приготованого у фосфатному буфері з рН 7,0, становив 480 нм, що практично збігається з літературними значеннями та підтверджує ідентичність досліджуваної речовини.

За результатами дослідження стандартних розчинів побудовано градуувальний графік залежності оптичної густини від концентрації барвника. Отримана залежність характеризувалася високою лінійністю, про що свідчить коефіцієнт детермінації $R^2 = 0,9942$. Це підтверджує придатність використаної методики для кількісного визначення E110 у харчових продуктах.

Досліджуваний напій «Mirinda Orange» перед аналізом дегазували та фільтрували. Після цього проводили сорбцію барвника на активованому алюміній оксиді, його десорбцію розчином натрій гідроксиду та фотометричне визначення. Концентрацію E110 розраховували за рівнянням градуувального графіка.

У результаті проведених досліджень встановлено, що вміст барвника E110 у напої «Mirinda Orange» становить $4,6 \pm 0,2$ мг/дм³. Отримане значення відповідає типовим

концентраціям синтетичних барвників у безалкогольних напоях. Розрахунки показали, що споживання 0,5 дм³ напою дорослою людиною масою 70 кг забезпечує надходження близько 0,033 мг Е110 на 1 кг маси тіла, що суттєво менше допустимої добової дози.

Запропонована сорбційно-спектрофотометрична методика має низку переваг порівняно з традиційними підходами. Вона не потребує дорогого хроматографічного обладнання, характеризується простотою виконання, достатньою точністю та відтворюваністю результатів. Крім того, використання алюміній оксиду як сорбенту дозволяє ефективно відокремлювати барвник від супутніх компонентів напою.

Таким чином, методом сорбційно-спектрофотометричного аналізу визначено вміст харчового барвника Е110 у газованому напої «Mirinda Orange». Встановлено, що концентрація барвника становить $4,6 \pm 0,2$ мг/дм³ і не створює ризику перевищення допустимої добової норми за умови помірного споживання продукту. Отримані результати підтверджують можливість використання запропонованої методики для контролю вмісту синтетичних барвників у безалкогольних напоях.

Список використаних джерел

1. Del Campo J. A., Miró-Cancela M. Natural Sources of Food Colorants as Potential Substitutes for Artificial Colorants. *Foods*. 2021. Vol. 12, No 22. P. 4102.
2. Auto-Mall «Е 110 добавка якої шкоди». URL: <https://auto-mall.com.ua/e-110-dobavka-kakoj-vred/> (дата звернення: 13.11.2025).
3. Arnold L. E., Lofthouse N., Hurt E. Artificial food colors and attentiondeficit/hyperactivity symptoms: conclusions to dye for. *Neurotherapeutics*. 2012. Vol. 9, No 3. P. 599–609
4. European Food Safety Authority (EFSA). EFSA evaluates Southampton study on food additives and child behaviour. *EFSA Journal*. Parma, 2008. 14 March. URL: <https://www.efsa.europa.eu/en/news/efsa-evaluates-southamptonstudy-food-additives-and-child-behaviour>.
5. Технічний аналіз харчових добавок та косметичних продуктів : підручник / В. І. Воробйова та ін. Київ : КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2020. 345 с.

КОЛЬОРОМЕТРИЧНЕ ВИЗНАЧЕННЯ БАРВНИКА ПОНСО 4R В БЕЗАЛКОГОЛЬНИХ НАПОЯХ

Євгеній Зубко, Олег Погребняк

*Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького
e-mail: evgenijzubko060@gmail.com*

Харчова промисловість активно використовує різноманітні технологічні добавки (барвники, консерванти, стабілізатори) для покращення зовнішнього вигляду, смаку та терміну зберігання продукції. Ці речовини природного або синтетичного походження виконують допоміжну роль і зазвичай не змінюють своєї хімічної структури у кінцевому продукті. Особливе місце серед них посідають синтетичні барвники, що забезпечують стабільне забарвлення. Одним із найпопулярніших є понсо 4R (Е124) – червоний азобарвник (тринатрієва сіль 1-[4-сульфо-1-нафтилазо]-2-нафтол-6,8-дисульфонової кислоти).

Завдяки інтенсивному кольору та здатності утворювати різні відтінки, Е124 масово використовується у виробництві напоїв, кондитерських, м'ясних та інших харчових виробів.

Попри технологічні переваги, безпечність барвника E124 (понсо 4R) є предметом дискусій. Його надмірне споживання може викликати алергічні реакції та гіперактивність у дітей. Через це в деяких країнах понсо 4R заборонений, а в Україні та ЄС його використання суворо регламентується. У зв'язку з цим контроль вмісту E124 у продуктах, особливо в масових безалкогольних напоях, є дуже актуальним.

Для визначення концентрації барвника ефективно застосовують спектрофотометричний (СФ) метод аналізу, що базується на вимірюванні інтенсивності забарвлення розчинів після відокремлення пігменту від матриці. В останній час широкого розповсюдження набула цифрова кольориметрія (Digital image colorimetry, DIC) – сучасний метод, де замість оптичної густини вимірюють цифрові параметри кольору (координати в просторах RGB, CIELAB тощо), використовуючи цифрові камери, смартфони, планшетні сканери або портативні цифрові датчики-колориметри [1].

У порівнянні зі класичною СФ для аналізу харчових продуктів (наприклад, визначення вмісту понсо 4R у безалкогольних напоях), цифрова колориметрія має унікальні переваги:

- робота з будь-якими зразками: на відміну від СФ, метод не потребує кювет та ідеальної прозорості. Можна аналізувати каламутні рідини, соуси чи порошки без складної пробопідготовки;

- доступність (смартфон-аналіз): камера звичайного смартфона та мобільні додатки замінюють дороге обладнання для зчитування колірних координат;

- експресність: цифровий аналіз відбувається миттєво за один клік, що ідеально для контролю якості на конвеєрі чи складі;

- економічність: система цифрової фіксації коштує у десятки разів дешевше за стаціонарні спектрофотометри [1].

Метою даної роботи є розроблення кольориметричної методики визначення понсо 4R та проведення моніторингу його вмісту у безалкогольних напоях з оцінюванням відповідності її концентрації гранично допустимим нормам.

Методика заснована на сорбції понсо 4R із аналізованого розчину алюміній оксидом, попередньо переведеного в аніоніт почерговою обробкою розчинами NaOH та HCl. Оброблений Al_2O_3 обмінюється аніонами Cl^- з аніонами барвника $[\text{C}_{20}\text{H}_{11}\text{ON}_2-(\text{SO}_3\text{Na})_2-\text{SO}_3]^-$, який знаходиться в розчині, і забарвлюється у різні відтінки червоного кольору залежно від вмісту понсо 4R. Зразки забарвлених осадів піддавали цифровій обробці та визначали вміст E124 методом градувального графіку.

В результаті досліджень зразків, які були придбані у квітні-травні 2026 р. у роздрібній мережі м. Черкаси, встановлено, що масові концентрації харчової добавки E124 в напоях не перевищували допустиму норму в безалкогольних ароматизованих напоях (до 30 мг/л) [2].

Результати апробації доводять можливість застосування запропонованої методики для контролю вмісту понсо 4R у досліджуваних рідких матрицях.

Список використаних джерел

1. Fan Y., Li J., Guo Y., Xie L., Zhang G. Digital image colorimetry on smartphone for chemical analysis: A review. Measurement. 2021. Vol. 171. Art. 108829.

2. Гуменюк О. Л. Харчові добавки : методичні вказівки. Чернівці : ЧНТУ, 2019. 85 с.

СЕКЦІЯ 5. ІННОВАЦІЙНІ ТЕХНОЛОГІЇ ВИКЛАДАННЯ ХІМІЇ ТА БІОЛОГІЇ У ВИЩІЙ ТА ЗАГАЛЬНООСВІТНІЙ ШКОЛІ

ВИКОРИСТАННЯ ШТУЧНОГО ІНТЕЛЕКТУ У ВИКЛАДАННІ ХІМІЇ: МОЖЛИВОСТІ ТА ПЕРСПЕКТИВИ

Людмила Люльченко

Уманський національний університет

e-mail: l.o.liulchenko@udpu.edu.ua

Сучасний розвиток інформаційних технологій суттєво впливає на систему освіти, зокрема на методи та підходи до викладання природничих дисциплін. Однією з найбільш перспективних технологій сьогодення є штучний інтелект, який активно впроваджується у різні сфери діяльності людини, у тому числі й у освітній процес. Використання інструментів штучного інтелекту відкриває нові можливості для підвищення якості навчання, розвитку пізнавальної активності здобувачів освіти та вдосконалення професійної діяльності викладача.

Особливо актуальним є застосування штучного інтелекту у викладанні хімії, адже ця дисципліна поєднує значний обсяг теоретичного матеріалу, практичні дослідження та потребує візуалізації складних процесів і явищ. За допомогою технологій штучного інтелекту можна створювати інтерактивні навчальні матеріали, моделювати хімічні реакції, використовувати віртуальні лабораторії, автоматизувати перевірку знань та забезпечувати індивідуальний підхід до навчання.

Водночас впровадження штучного інтелекту в освітній процес супроводжується певними викликами, серед яких питання академічної доброчесності, достовірності інформації та необхідності формування цифрової компетентності педагогів. Саме тому дослідження можливостей і перспектив використання штучного інтелекту у викладанні хімії є важливим і актуальним напрямом сучасної педагогічної науки.

Штучний інтелект (ШІ) – це галузь інформаційних технологій, що спрямована на створення комп'ютерних систем, здатних виконувати завдання, які зазвичай потребують людського мислення. До таких завдань належать аналіз інформації, розпізнавання тексту й зображень, логічне мислення, прогнозування, навчання та прийняття рішень. Сучасні системи штучного інтелекту базуються на алгоритмах машинного навчання, нейронних мережах і великих масивах даних, що дозволяє їм постійно вдосконалювати результати своєї роботи.

У сфері освіти штучний інтелект стає важливим інструментом модернізації навчального процесу. Його використання сприяє підвищенню ефективності навчання, урізноманітненню методів подачі матеріалу та забезпеченню індивідуального підходу до здобувачів освіти. Інструменти ШІ можуть аналізувати рівень знань студентів, адаптувати навчальні завдання відповідно до їхніх потреб, надавати миттєвий зворотний зв'язок та допомагати у засвоєнні складних тем.

Освітній потенціал штучного інтелекту особливо помітний у викладанні природничих дисциплін, зокрема хімії. Завдяки ШІ викладачі мають можливість створювати

інтерактивні презентації, тести, віртуальні лабораторні роботи та моделі хімічних процесів. Це сприяє кращому розумінню навчального матеріалу, розвитку дослідницьких навичок і підвищенню мотивації студентів до навчання. Окрім, використання штучного інтелекту дозволяє оптимізувати роботу викладача. Системи ШІ можуть автоматично перевіряти тестові завдання, генерувати навчальні матеріали, добирати додаткові ресурси та допомагати у плануванні занять. Таким чином, штучний інтелект стає не лише технологічним засобом навчання, а й важливим елементом сучасного освітнього середовища.

Важливу роль штучний інтелект відіграє у візуалізації хімічних процесів. За допомогою цифрових моделей і симуляцій можна демонструвати будову молекул, перебіг хімічних реакцій, механізми взаємодії речовин та інші складні процеси, які важко уявити під час традиційного навчання. Візуалізація сприяє кращому розумінню матеріалу та розвитку просторового мислення студентів. Перспективним напрямом є використання віртуальних лабораторій та інтерактивних симуляцій. Такі технології дозволяють проводити досліді у цифровому середовищі без ризику для здоров'я та без потреби у великій кількості реактивів і лабораторного обладнання. Віртуальні лабораторії особливо актуальні в умовах дистанційного або змішаного навчання.

Використання штучного інтелекту в хімічній освіті має низку переваг, які позитивно впливають на якість навчального процесу, ефективність викладання та рівень засвоєння знань здобувачами освіти. Сучасні технології дозволяють зробити навчання більш інтерактивним, доступним і адаптованим до потреб студентів. Однією з головних переваг є підвищення мотивації до вивчення хімії. Завдяки використанню інтерактивних платформ, віртуальних лабораторій, анімацій та симуляцій навчальний матеріал стає більш зрозумілим і цікавим. Візуалізація складних хімічних процесів допомагає студентам краще сприймати інформацію та підтримує їхню пізнавальну активність.

Важливою перевагою є можливість індивідуалізації навчання. Системи штучного інтелекту можуть аналізувати рівень підготовки студентів, визначати прогалини у знаннях та пропонувати персоналізовані завдання й рекомендації. Це сприяє більш ефективному засвоєнню матеріалу та дозволяє враховувати індивідуальні особливості кожного здобувача освіти. Штучний інтелект також забезпечує швидкий зворотний зв'язок і автоматизацію оцінювання знань. Перевірка тестів, аналіз відповідей та формування результатів можуть здійснюватися автоматично, що значно економить час викладача. Завдяки цьому педагог може більше уваги приділяти практичній роботі, організації досліджень і розвитку творчих здібностей студентів.

Ще однією перевагою є доступність навчання. Інструменти штучного інтелекту дозволяють організовувати дистанційне та змішане навчання, забезпечуючи доступ до освітніх ресурсів у будь-який час. Це особливо важливо в сучасних умовах цифровізації освіти.

Попри значні переваги використання штучного інтелекту в освітньому процесі, його застосування у викладанні хімії супроводжується певними проблемами та ризиками. Їх необхідно враховувати для забезпечення ефективного та безпечного використання сучасних технологій у навчанні. Однією з основних проблем є питання академічної доброчесності. Використовуючи інструменти штучного інтелекту, студенти можуть отримувати готові відповіді на завдання, лабораторні роботи чи тести без самостійного

опрацювання матеріалу. Це може негативно впливати на рівень знань, розвиток критичного мислення та формування практичних навичок.

Важливим ризиком є недостовірність інформації, яку можуть надавати системи штучного інтелекту. Іноді ШІ генерує помилкові або неточні відповіді, особливо щодо складних хімічних понять, формул чи механізмів реакцій. Тому викладач і студенти повинні критично оцінювати отриману інформацію та перевіряти її за науковими джерелами.

Ще однією проблемою є недостатній рівень цифрової компетентності окремих викладачів і здобувачів освіти. Для ефективного використання ШІ необхідні навички роботи з цифровими технологіями, вміння правильно формулювати запити та аналізувати результати роботи програм. Відсутність таких навичок може ускладнювати впровадження інновацій у навчальний процес. Суттєвим фактором також є технічні та матеріальні обмеження. Не всі заклади освіти мають достатнє технічне забезпечення, стабільний доступ до мережі Інтернет або сучасне програмне забезпечення для повноцінного використання інструментів штучного інтелекту. Існує ризик надмірної залежності від цифрових технологій. Надто часто використання ШІ може зменшувати рівень самостійності студентів, їхню здатність до аналізу, логічного мислення та творчого підходу до розв'язання навчальних завдань.

Розвиток штучного інтелекту відкриває широкі перспективи для вдосконалення хімічної освіти та модернізації освітнього процесу. Сучасні цифрові технології поступово стають невід'ємною складовою навчання, а їх подальший розвиток сприятиме підвищенню якості підготовки майбутніх фахівців.

Одним із перспективних напрямів є створення адаптивних навчальних систем, здатних автоматично підлаштовувати навчальний матеріал під рівень знань, темп роботи та індивідуальні потреби студентів. Такі системи допоможуть забезпечити більш ефективне засвоєння хімічних понять і сприятимуть формуванню індивідуальної освітньої траєкторії. Важливе значення матиме подальший розвиток віртуальних лабораторій та інтерактивних симуляцій. Завдяки штучному інтелекту студенти зможуть проводити складні хімічні досліди у цифровому середовищі, аналізувати результати експериментів та моделювати різноманітні хімічні процеси. Це підвищить рівень практичної підготовки та зробить навчання більш безпечним і доступним.

У майбутньому штучний інтелект може стати важливим помічником викладача. Інтелектуальні системи зможуть автоматично створювати навчальні матеріали, аналізувати успішність студентів, прогнозувати труднощі у навчанні та пропонувати оптимальні методи викладання. Це дозволить підвищити ефективність освітнього процесу та оптимізувати професійну діяльність педагогів.

Отже, використання штучного інтелекту у викладанні хімії є перспективним напрямом розвитку сучасної освіти. Технології ШІ сприяють підвищенню ефективності навчання, забезпечують інтерактивність, персоналізацію освітнього процесу та полегшують роботу викладача. Водночас важливо враховувати ризики, пов'язані з академічною доброчесністю, достовірністю інформації та необхідністю розвитку цифрових компетентностей. Раціональне поєднання штучного інтелекту з традиційними методами навчання сприятиме підвищенню якості хімічної освіти та підготовці конкурентоспроможних фахівців.

ТЕСТУВАННЯ ЯК ФОРМА КОНТРОЛЮ ТА ОЦІНЮВАННЯ ЗНАНЬ ЗДОБУВАЧІВ ВИЩОЇ ОСВІТИ У ПРОЦЕСІ ВИКЛАДАННЯ ХІМІЧНИХ ДИСЦИПЛІН

Оксана Мисіна, Надія Буденкова

*Національний університет водного господарства та природокористування
вул. Соборна, 11, 33000, м. Рівне
e-mail: o.i.mysina@nuwm.edu.ua*

Сьогодні в Україні триває процес реформування сфери освіти, що вимагає нових підходів до організації освітнього процесу, а відтак і до форм контролю та оцінювання освітніх досягнень здобувачів вищої освіти під час вивчення хімічних дисциплін у вищих навчальних закладах. Контроль занять став актуальнішим не лише через потребу оцінити рівень студентів, а й через прагнення модернізувати освітній процес загалом.

У сучасній освіті тестування визнають одним із найбільш результативних та об'єктивних способів перевірки знань здобувачів, зокрема під час вивчення хімічних дисциплін [1, 2]. Якісні тестові завдання підтримують високий рівень якості вищої освіти, сприяють підвищенню фахового рівня здобувачів і допомагають ефективніше керувати освітнім процесом. Крім того, тести дозволяють комплексно оцінити рівень засвоєння матеріалу та ступінь практичної готовності майбутніх спеціалістів. Сам тест функціонує як цілісна система, що поєднує вивірений комплекс завдань, уніфікований регламент проведення та чітко визначену технологію аналізу отриманих даних. Головна мета тесту – оцінити знання та навички, які студент здобуває і розвиває під час систематичного навчання хімії.

Проведення контролю знань студентів із застосуванням системи Moodle – це процес, який дозволяє викладачу за мінімальних часових затрат об'єктивно перевірити рівень знань значної кількості студентів. Добре спланований графік перевірки рівня знань є хорошим стимулом для систематичної роботи здобувача вищої освіти впродовж семестру. Означений метод перевірки рівня знань і вмій позитивно сприймається студентами, наприклад, перевагою цього виду контролю є автоматична перевірка знань та виключення будь-якого впливу людини на остаточний результат [3].

Викладачі формують бази завдань та еталонні відповіді до них для оцінювання рівня професійних знань, умінь та навичок студентів, ступеня сформованості їх професійної компетенції (теоретичні та практичні завдання), які повинні складатись з таких рівнів складності:

- достатній рівень – вимагає знання і розуміння основних положень навчального матеріалу;
- вище достатнього рівня – передбачає повне засвоєння навчального матеріалу, володіння понятійним апаратом, орієнтування у вивченому матеріалі, свідоме використання знань для вирішення завдань;
- високий рівень – передбачає глибоке і повне опанування змісту навчального матеріалу, в якому студент вільно орієнтується, володіє понятійним апаратом, демонструє уміння пов'язувати теорію з практикою, вирішувати практичні завдання, висловлювати і обґрунтовувати свої судження.

База завдань повинна містити всі рівні складності, незалежно від виду контролю: 60–70 % – питання першого рівня; 20–30 % – другого рівня, 10 % – третього рівня.

Використання редактора Microsoft Word дає змогу суттєво пришвидшити створення тестових питань, особливо якщо йдеться про їх підготовку у великій кількості. Набір завдань здійснюється в програмному забезпеченні Microsoft Word за спеціально створеним шаблоном (GIFT and XML for Moodlewith Image (v 3.5.1).dot), в якому є вбудовані макроси для створення тестів. За один поточний модульний контроль студент має дати відповідь на 30 запитань, а за підсумковий контроль – на 40 запитань.

Як бачимо, тестування – це ефективна, зручна, надійна, оперативна та об'єктивна форма контролю та оцінювання знань студентів у вищих навчальних закладах.

Список використаних джерел

1. Гавриленко Н. І. Тестування як форма об'єктивного контролю та діагностики знань здобувачів вищої освіти. *Імідж сучасного педагога*, 2018, 5(182), С. 38–40.
2. Кирилів М. В. Використання тестового контролю знань студентів при вивченні дисципліни «Медична хімія». *Медична освіта*, 2012, (4), С. 56–58.
3. Мисіна О., Буденкова Н. Використання сучасних інформаційно-комунікативних технологій у процесі викладання хімічних дисциплін у закладі вищої освіти. *Нова педагогічна думка*. 2025. Том 122, № 2. С. 55-61. <https://doi.org/10.37026/2520-6427-2025-122-2-55-61>

ІНТЕГРАЦІЯ ХІМІЇ З БІОЛОГІЄЮ ТА ЕКОЛОГІЄЮ В СТАРШІЙ ШКОЛІ

Тетяна Озеран, Валентина Литвин

Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького

e-mail: ozeran.tetiana2225@vu.edu.ua

У сучасних умовах стрімкого розвитку науки й техніки, а також загострення глобальних екологічних проблем, особливої актуальності набуває інтеграція природничих дисциплін під час навчання. Хімія, біологія та екологія, як взаємопов'язані галузі знань, відіграють важливу роль у формуванні цілісного наукового світогляду учнів старшої школи. Саме поєднання цих наук сприяє глибшому розумінню природних процесів, закономірностей функціонування живих систем та взаємодії людини з навколишнім середовищем.

Інтеграція хімії з біологією та екологією в освітньому процесі дозволяє не лише підвищити рівень засвоєння навчального матеріалу, а й сформувати в учнів екологічне мислення, відповідальне ставлення до природи та здатність застосовувати знання на практиці. Такий підхід відповідає сучасним освітнім тенденціям, зокрема компетентнісному навчанню, яке передбачає розвиток критичного мислення, уміння аналізувати інформацію та приймати обґрунтовані рішення.

Актуальність теми зумовлена необхідністю вдосконалення теоретичних і практичних аспектів інтегрованого навчання природничих дисциплін. Сучасний учитель хімії зіштовхується з потребою урізноманітнення освітнього процесу для підвищення мотивації учнів до навчання. Поєднання навчального матеріалу з хімії, біології та екології дає можливість створювати інтерактивні та практикоорієнтовані уроки.

Дослідження теоретичних засад інтеграції хімії з біологією та екологією в старшій школі та оцінка ефективності інтегрованого підходу вже стали важливими частинами практичної підготовки майбутнього вчителя. Для досягнення поставленої мети визначаються такі завдання: аналіз науково-методичної літератури з проблеми

дослідження; визначення сутності та особливостей інтегрованого навчання; апробація інтегрованого підходу у викладанні природничих дисциплін; оцінка його впливу на якість знань учнів.

Об'єктом дослідження стають учні старшої школи. Предметом дослідження є педагогічні умови реалізації міжпредметної інтеграції, розробка інтегрованих навчальних матеріалів та оцінка їхнього впливу на рівень навчальних досягнень учнів.

У процесі дослідження використовуються теоретичні методи, зокрема аналіз наукової та методичної літератури, порівняльний аналіз підходів до інтеграції природничих дисциплін, а також емпіричні методи: педагогічне спостереження, тестування та аналіз результатів навчальної діяльності учнів.

Наукова новизна полягає у теоретичному обґрунтуванні та практичній реалізації інтеграції хімії з біологією та екологією в освітньому процесі старшої школи. Використання міжпредметних зв'язків сприяє формуванню природничо-наукової компетентності учнів, розвитку дослідницьких умінь і навичок, а також підвищенню рівня пізнавальної активності.

Практичне значення досліджень полягає у можливості використання розроблених інтегрованих підходів та методичних матеріалів у практиці викладання хімії в старшій школі. Інтегроване навчання сприяє створенню безпечного, сучасного та інтерактивного освітнього середовища, у якому учні можуть застосовувати отримані знання для вирішення реальних життєвих проблем.

Таким чином, інтеграція хімії з біологією та екологією є ефективним засобом підвищення якості природничої освіти. Вона забезпечує цілісність знань, сприяє формуванню екологічної свідомості та підготовці учнів до взаємодії у сучасному суспільстві.

Список використаних джерел

1. Бібік Н. М. Компетентнісний підхід у сучасній освіті. Київ : К.І.С., 2004. 112 с.
2. Гриневич Л. В. Освітні реформи в Україні: концептуальні засади. Київ, 2016. 64 с.
3. Державний стандарт повної загальної середньої освіти : Постанова Кабінету Міністрів України від 23.11.2011 № 1392.
4. Нова українська школа : концептуальні засади реформування середньої школи. Київ : Міністерство освіти і науки України, 2016.
5. Пометун О. І. Сучасний урок. Інтерактивні технології навчання. Київ : А.С.К., 2004. 192 с.

ТЕХНОЛОГІЯ МІКРОНАВЧАННЯ ЯК ІНСТРУМЕНТ РЕАЛІЗАЦІЇ ЗМІШАНОГО НАВЧАННЯ ХІМІЇ

Ігор Швець

Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького

e-mail: igorshv17@vnu.edu.ua

Сучасний розвиток цифрових технологій сприяє активному впровадженню змішаного навчання в освітній процес, яке поєднує традиційні форми організації навчання з використанням цифрових ресурсів та онлайн-інструментів. Однією з перспективних технологій у межах змішаного навчання є мікронавчання, що передбачає структурування навчального матеріалу у вигляді невеликих логічно завершених змістових блоків. Такий

підхід сприяє полегшенню сприйняття інформації, зменшенню когнітивного навантаження учнів та підвищенню ефективності засвоєння навчального матеріалу [1].

Метою дослідження є визначення можливостей використання технології мікронавчання у процесі викладання хімії в закладах загальної середньої освіти.

Апробація окремих елементів технології мікронавчання здійснювалася під час виробничої педагогічної практики з хімії, яка проходила на базі Чигиринського ліцею № 1 імені Богдана Хмельницького у період з 30.03.2026 по 24.04.2026. У процесі практичної діяльності проводилося відвідування, аналіз та проведення уроків у 8–11 класах. Дослідження здійснювалося із застосуванням методів педагогічного спостереження, аналізу навчальної діяльності учнів та узагальнення результатів практичної діяльності.

Наприклад, під час проведення уроку у 10 класі на тему «Алкани: будова, властивості, застосування» навчальний матеріал було поділено на п'ять мікромодулів: «Будова молекул алканів», «Гомологічний ряд», «Номенклатура», «Хімічні властивості» та «Практичне застосування». Після завершення кожного блоку учні виконували короткі завдання: визначали формули речовин, встановлювали відповідність між назвами та структурними формулами, аналізували приклади застосування алканів.

Для оцінювання ефективності використання елементів мікронавчання під час проведення уроку у 10 класі здійснювалося педагогічне спостереження за навчальною діяльністю учнів. Аналізувалися такі показники, як рівень залученості учнів до роботи, самостійність виконання завдань, активність під час обговорення та зацікавленість навчальним матеріалом. Результати спостереження наведено в таблиці 1.

Таблиця 1.

Результати педагогічного спостереження за навчальною діяльністю учнів 10 класу під час використання елементів мікронавчання

Показник	До використання мікромодулів	Після використання мікромодулів
Активна участь учнів у виконанні завдань	середня	висока
Кількість учнів, залучених до обговорення	10–12	15–18
Самостійність виконання завдань	середня	достатня
Швидкість виконання коротких завдань	помірна	підвищена
Рівень зацікавленості навчальним матеріалом	середній	високий

Представлені результати свідчать, що використання технології мікронавчання позитивно впливає на організацію навчальної діяльності учнів. Поділ матеріалу на невеликі змістові блоки сприяв активізації пізнавальної діяльності, підтриманню уваги та підвищенню рівня самостійності учнів у процесі виконання навчальних завдань.

Під час вивчення теми «Хімічна рівновага» у 9 класі використовувалися короткі навчальні блоки, що супроводжувалися проблемними запитаннями: «Що відбудеться при зміні температури?», «Як вплине зміна концентрації реагентів?». Після кожного мікроблоку учні аналізували конкретні ситуації та прогнозували зміщення рівноваги відповідно до принципу Ле Шательє.

Також під час лабораторного заняття у 11 класі на тему «Дослідження властивостей білків і вуглеводів» технологія мікронавчання реалізовувалась шляхом використання коротких відеомодулів, попередньо підготовлених магістрантом. До початку виконання експериментальної роботи учні переглядали відеофрагменти тривалістю 2–3 хвилини, у яких демонструвалися мета досліджу, правила техніки безпеки, послідовність виконання

експерименту та очікувані результати реакцій. Після перегляду кожного відеомодуля учні виконували окремий етап лабораторної роботи та аналізували отримані результати. Такий підхід сприяв поєднанню самостійного опрацювання інформації з практичною діяльністю та забезпечував більш усвідомлене виконання експериментальних завдань.

Використання інтерактивних завдань після кожного мікромодуля сприяло активізації навчально-пізнавальної діяльності учнів [2].

Педагогічне спостереження показало, що поділ навчального матеріалу на короткі логічно завершені блоки сприяв активізації навчально-пізнавальної діяльності учнів, підтриманню їхньої уваги протягом уроку та підвищенню рівня самостійності під час виконання завдань.

Отримані результати узгоджуються з дослідженнями щодо використання цифрових освітніх технологій у навчанні хімії, які демонструють підвищення навчальної мотивації та активності учнів [3, 4].

Таким чином, технологія мікронавчання є ефективним інструментом реалізації змішаного навчання хімії, що сприяє підвищенню мотивації учнів, формуванню предметних компетентностей та покращенню якості засвоєння навчального матеріалу.

Список використаних джерел

1. Hug T. *Micro Learning and Narration: Exploring Possibilities of Utilization of Narrations and Storytelling for the Designing of "Micro Units" and Didactical Micro-Learning Arrangements* // Proceedings of the International Conference «Media in Transition 4: The Work of Stories». Cambridge : MIT, 2005. P. 13.
2. Лут О. А., Шафорост Ю. А., Литвин В. А. Інтеграція віртуальних лабораторних практикумів у шкільний курс хімії. *Вісник науки та освіти. Серія «Педагогіка»*. 2025. № 2(32). С. 1167-1180. [https://doi.org/10.52058/2786-6165-2025-2\(32\)-1167-1180](https://doi.org/10.52058/2786-6165-2025-2(32)-1167-1180).
3. Шафорост Ю., Лут О., Шпак В. Використання віртуальних симуляцій як засобу едьютейнменту для підвищення мотивації учнів у навчанні хімії. *Науковий вісник Ужгородського університету. Серія: «Педагогіка. Соціальна робота»*. 2024. 2(55). С. 135-143. <http://dx.doi.org/10.24144/2524-0609.2024.55.135-143>.
4. Monib W. K., Qazi A., Apong R. A. Microlearning beyond boundaries: A systematic review and a novel framework for improving learning outcomes. *Heliyon*. 2025. Vol. 11, Issue 2. Article e41413. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2024.e41413>.

ПРАКТИКО-ОРІЄНТОВАНЕ НАВЧАННЯ ОРГАНІЧНОЇ ХІМІЇ ЗАСОБАМИ ВИГОТОВЛЕННЯ КОСМЕТИЧНИХ ПРОДУКТІВ

Юлія Шафорост, Дар'я Баранова

Черкаський національний університет

імені Богдана Хмельницького

e-mail:baranova.daria2221@vu.cdu.edu.ua

Одним із ключових завдань оновленої системи природничої освіти є подолання розриву між академічною теорією та її реальним застосуванням. Вивчення хімії сьогодні потребує таких підходів, які б не лише забезпечували засвоєння фундаментального матеріалу, а й формували у здобувачів освіти прикладні навички, необхідні у повсякденному житті. Практико-орієнтоване навчання є одним із найефективніших інструментів вирішення цього завдання, оскільки воно дозволяє трансформувати

абстрактні наукові факти у конкретний життєвий досвід. Особливої актуальності сьогодні набуває інтеграція STEM-підходів (Science, Technology, Engineering, Mathematics) у процес вивчення хімії в профільній старшій школі, що повністю відповідає сучасним тенденціям розвитку та впровадження інновацій у загальноосвітніх навчальних закладах [1]. Використання знайомих та привабливих для підлітків об'єктів, таких як косметичні засоби ручної роботи, дозволяє подолати бар'єр нерозуміння складних понять та суттєво підвищити мотивацію.

Метою роботи є обґрунтування доцільності та демонстрація практичної ефективності практико-орієнтованого навчання органічної хімії через організацію та проведення STEM-заняття з виготовлення косметичних продуктів для учнів старшої школи. Теоретичне підґрунтя виготовлення шипучих бомбочок для ванн базується на класичній реакції між слабкою органічною багатоосновною кислотою (зокрема лимонною) та натрій гідрогенкарбонатом у водному середовищі. Цей процес супроводжується інтенсивним виділенням вуглекислого газу, що наочно візуалізує хімічну взаємодію. Вивчення цих процесів у межах шкільного курсу дозволяє поглибити знання про властивості органічних сполук, значення водневого показника для шкіри людини, а також роль каталізаторів.

Для апробації запропонованої методики в межах магістерського дослідження було розроблено та проведено практичне STEM-заняття для учнів 10 класу природничого профілю. На момент проведення уроку дослідна група налічувала 20 осіб. З метою розвитку навичок ефективної комунікації та проєктної роботи, учнівський колектив було об'єднано у 5 робочих груп по 4 особи. Такі підходи до організації командної діяльності є ключовими особливостями успішного впровадження STEM-освіти в навчальний процес [2].

Заняття розпочалося з демонстрації структурованої мультимедійної презентації. У ній було детально роз'яснено кожен крок практичної роботи та чітко артикульовано, як саме процес створення косметики інтегрується в STEM. Наукова складова (Science) охоплювала вивчення хімічного складу інгредієнтів та розуміння механізму реакції. Технологічний аспект (Technology) передбачав точне вимірювання маси речовин та дотримання технологічної карти. Інженерна частина (Engineering) розкривалася через підбір правильної консистенції для досягнення структурної цілісності та надання виробам стабільної форми. Математична складова (Mathematics) базувалася на розрахунку пропорцій та проведенні фінансово-економічного аналізу.

Практична частина заняття передбачала безпосередню роботу з реактивами у форматі мінілабораторії. Учні самостійно змішували всі необхідні інгредієнти за чітким алгоритмом: спочатку проводили точне зважування сухої основи на електронних вагах, потім у ступці ретельно розтирали компоненти для запобігання утворенню грудочок. Після підготовки бази учні обережно додавали барвник та ефірні олії, поступово звожуючи суміш і доводячи масу до консистенції вологого піску (рис. 1). На фінальному етапі конструювання десятикласники щільно пресували суміш і надавали бомбочкам форму за допомогою форм у вигляді сфер. Цей етап вимагав підвищеної акуратності, синхронності дій у групі та безумовного дотримання правил техніки безпеки при роботі з дрібнодисперсними речовинами.

Надзвичайно важливим етапом, який забезпечив зв'язок хімії з реальним життям та основами мікроекономіки, став розрахунковий блок. Після завершення практичної роботи кожна група самостійно розраховувала точну собівартість однієї готової бомбочки для ванн. Алгоритм розрахунку включав визначення вартості кожного витраченого грама сировини та підсумовування загальних витрат на групу з подальшим діленням на

кількість виготовлених одиниць. Наступним кроком стало порівняння отриманої собівартості з середньою ринковою ціною аналогічного комерційного продукту, придбаного у мас-маркеті. Це викликало надзвичайно жваве обговорення серед десятикласників, адже вони наочно побачили маркетингову націнку брендів і зрозуміли економічну вигоду від створення базової косметики власноруч.



Рис. 1. Проведення STEM-заняття з виготовлення бомбочок для ванн

Проведене заняття підтвердило високу результативність практико-орієнтованого підходу. Результати педагогічного експерименту та статистичного аналізу засвідчили стійку позитивну динаміку: порівняння зрізів знань до та після проведення уроку показало помітне зростання середнього академічного балу в групі. Переважна більшість учнів продемонстрували глибокий рівень засвоєння теми, а також змогли самостійно та безпомилково відтворити алгоритм економічних розрахунків.

За результатами підсумкового анкетування абсолютна більшість десятикласників відзначила суттєве зростання особистої мотивації до вивчення природничих наук. Цілеспрямоване використання елементів STEM-освіти безпосередньо на уроках хімії довело, що поєднання хімічного експерименту з математичними, технологічними та економічними розрахунками успішно трансформує стандартний шкільний урок у повноцінний міждисциплінарний проєкт, який готує учнів до реального життя [3, 4].

Список використаних джерел

1. Ramankulov S., Çoruh A., Nurizinova M., Rizakhoyeva G., Kelesbayev K., Khikmatulla S. How does the development of STEM products in the learning process affect the development of students' applied-oriented skills? *Frontiers in Education*. 2026. Vol. 11. Art. 1774470. DOI: 10.3389/feduc.2026.1774470.
2. Балик Н. Р., Шмигер Г. П. Підходи та особливості сучасної STEM-освіти. *Фізико-математична освіта*. 2017. Вип. 2(12). С. 26–30.
3. Nikitina I., Ishchenko T. Implementation of STEM education system in Ukraine. *Scientific Journal of Polona University*. 2022. Vol. 51, No 2. P. 108–114. DOI: 10.23856/5114.
4. Барабаш Л. М., Пономаренко Г. А. STEM-освіта як шлях до розвитку обдарованості здобувачів освіти в процесі інтеграції шкільних предметів. *Обдаровані діти – скарб нації! : матеріали V Міжнар. наук.-практ. онлайн-конф. (м. Київ, 23–29 жовт. 2024 р.)*. Київ : Інститут обдарованої дитини НАПН України, 2024. С. 65–76.

ДИФЕРЕНЦІАЦІЯ НАВЧАННЯ ХІМІЇ ЯК ЗАСІБ ПІДТРИМКИ УЧНІВ З РІЗНИМ РІВНЕМ ПІДГОТОВКИ

Валентина Литвин, Анастасія Войко

*Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького
e-mail: litvin_valentina@vu.cdu.edu.ua*

Сучасний урок хімії сьогодні в Україні – це не просто передавання формул і рівнянь. У класі завжди є учні, які швидко схоплюють матеріал, і ті, кому потрібен додатковий час, пояснення або інший спосіб подачі. Через це вчителю доводиться шукати такі методи, які дозволяють кожному учневі рухатися вперед, не втрачаючи інтересу та впевненості у власних силах. Диференціація навчання стає одним із найважливіших інструментів, що допомагає врахувати індивідуальні можливості школярів і зробити вивчення хімії доступним та посильним для всіх [1].

Актуальність теми зумовлена тим, що в сучасній школі рівень підготовки учнів дуже різниться: хтось має сильну природничу базу, а хтось лише починає розуміти основи. Якщо вчитель працює з однаковим підходом, методикою для всіх учнів, частина учнів втрачає мотивацію, сильні нудьгують, слабші не встигають, і як результат, в цілому низький та без заохочень. Диференційований підхід дозволяє уникнути цього, оскільки він дає можливість кожному учневі працювати на своєму рівні складності, отримувати посильні завдання, бачити власний прогрес і не боятися помилок.

У хімії це особливо важливо, адже предмет поєднує абстрактні поняття, практичні навички, логічне мислення та роботу з формулами. Тому продумана диференціація допомагає не лише підвищити успішність, а й сформувати інтерес до науки, впевненість у власних можливостях і бажання вчитися далі.

Під час вивчення нітрогеновмісних органічних сполук у 10 класі нами було проведено простий дослід із денатурацією білка. У пробірку з розведеним яєчним білком учні додавали гарячу воду. Уже за кілька секунд білок мутнів і згортався, що наочно показувало зміну його структури під дією температури. Це дозволило підкреслити, що білки є складними нітрогеновмісними сполуками, чутливими до зовнішніх умов.

Для учнів різного рівня були сформовані різні завдання: одні описували спостереження, інші пояснювали явище словами, а сильніші пов'язували його з будовою амінокислот і руйнуванням просторової структури білка. Такий короткий дослід допоміг усім учням зрозуміти тему на доступному рівні та показав ефективність диференційованого підходу [2].

Наступним експериментом був простий дослід з теми «Сахароза, крохмаль і целюлоза», пов'язаний з гідролізом крохмалю. Учні готували розчин крохмалю, додавали до нього кілька крапель розчину йоду й спостерігали характерне синє забарвлення. Потім до цієї суміші додавали невелику кількість розчину кислоти та обережно нагрівали. Через деякий час синє забарвлення зникало, що свідчило про руйнування довгого ланцюга крохмалю та його гідроліз до простіших вуглеводів, які вже не дають синього комплексу з йодом.

Такий дослід дозволив пов'язати молекулярну будову полісахаридів з їхніми хімічними властивостями, показати на практиці, що крохмаль – це не просто порошок, а полімер, який може розщеплюватися. На відміну від досліду з денатурацією білка, тут акцент робився не на зміні просторової структури, а саме на гідролізі та відмінностях між простими й складними вуглеводами, що допомогло учням краще зрозуміти зміст теми «Вуглеводи».

В підсумку, були проведені тестові завдання різної складності, які показали, що близько 42 % учнів успішно виконали тестові завдання на високому рівні. Приблизно 38 % показали середній рівень засвоєння матеріалу. Ще 17 % справилися лише на мінімальний рівень. Лише 3 % учнів не подолали поріг, що підтвердило потребу в диференційованому підході.

Проведені спостереження та невеликі експерименти в 10 класі показали, що диференційований підхід справді підсилює розуміння хімічних тем [3]. Учні по-різному реагують на один і той самий матеріал: частина легко працює з формулами й рівняннями, інша потребує опори на наочність і прості спостереження. Виконання коротких досліджень дало змогу залучити всіх учнів і показало, що диференціація не ускладнює урок, а робить його доступнішим.

Список використаних джерел

1. Кравченко О. В. Диференціація навчання хімії в умовах сучасної школи : методичні підходи та результати впровадження // Наукові записки НПУ ім. М. П. Драгоманова. 2021. № 4. С. 112–118.
2. Савченко І. М. Особливості засвоєння органічної хімії учнями старшої школи та шляхи підвищення мотивації // Педагогічний дискурс. 2022. № 33. С. 85–90.
3. Гордієнко Л. М. Особливості формування хімічних понять у старшокласників під час вивчення органічних сполук // Хімія в школі. 2022. № 3. С. 21–25.

СЕКЦІЯ 6. ЕКОЛОГІЧНА ХІМІЯ

ТЕРМОГРАВІМЕТРИЧНЕ ДОСЛІДЖЕННЯ ШЛАМОВИХ ВІДХОДІВ ВИРОБНИЦТВА ВІСКОЗНОГО ВОЛОКНА

Юлія Шафрост, Антон Беляєв, Владислав Тарадайка

Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького

e-mail: ZdorYulia@ukr.net

Промислові шламові відходи, що утворюються під час виробництва віскозного волокна, належать до складних багатокомпонентних систем та можуть становити значну екологічну небезпеку [1, 2]. Їх тривале накопичення у шламосховищах призводить до ризику забруднення ґрунтів, поверхневих і підземних вод важкими металами та органічними сполуками. Одним із шляхів розробки ефективних технологій переробки таких відходів є дослідження їх термічних властивостей, що дозволяє встановити оптимальні режими подальшої обробки.

Шламові відходи виробництва віскозного волокна характеризуються високою неоднорідністю складу та значним вмістом води, який може досягати 80 %. Крім того, у їхньому складі можуть бути присутні органічні залишки виробництва, сполуки кальцію, феруму, цинку та інші компоненти. Такий склад ускладнює використання традиційних методів утилізації та вимагає попереднього дослідження фізико-хімічних властивостей відходів [3, 4].

Метою роботи було дослідження термічної поведінки шламових відходів виробництва віскозного волокна методом термогравіметричного аналізу для визначення температурних режимів їх ефективної переробки.

Для проведення досліджень проби шламу відбирали зі шламонакопичувача колишнього підприємства ВАТ «Черкаське хімволокно». Термічні характеристики досліджували методом одночасного термогравіметричного аналізу (ТГ) та диференційної скануючої калориметрії (ДСК) із використанням приладу STA 449F Jupiter (NETZSCH). Метод дозволяє одночасно оцінити зміну маси зразка та теплові ефекти, що супроводжують фізико-хімічні перетворення під час нагрівання (рис. 1).

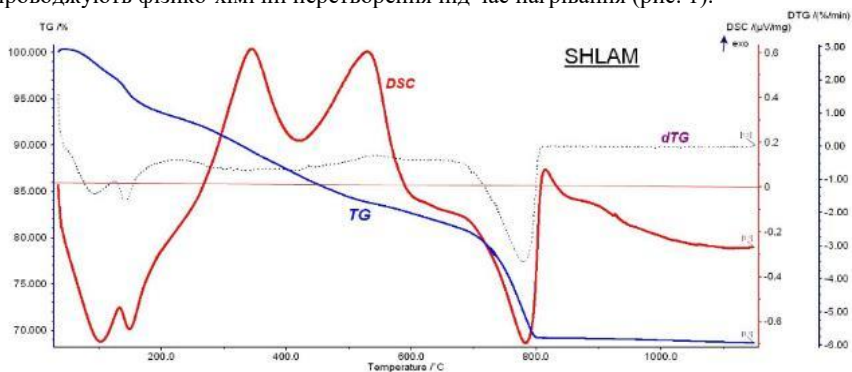


Рис. 1. Термограма шламових відходів віскозного виробництва, отримана методом ТГ-ДСК

Однчасне використання ТГ та ДСК аналізу дозволяє не лише встановити кількісні зміни маси досліджуваного матеріалу, а й визначити характер теплових процесів, що супроводжують структурні та фазові перетворення. Такий підхід дає змогу встановити температурні інтервали перебігу фізико-хімічних процесів та визначити умови подальшої технологічної переробки шламів.

Аналіз отриманих термограм показав багатостадійний характер термічного розкладання шламових відходів. На першому етапі в температурному інтервалі до 200 °С спостерігалися ендотермічні ефекти, що супроводжувалися втратою маси близько 7 %. Це пов'язано з видаленням фізично та хімічно зв'язаної води.

У температурному діапазоні 200–500 °С зафіксовано екзотермічні піки та втрату маси приблизно на 10 %, що пояснюється процесами окиснення та згоряння органічних компонентів шламу, зокрема залишків віскози та інших органічних домішок.

Подальше підвищення температури до близько 800 °С супроводжувалося різким ендотермічним ефектом, який пов'язаний із розкладанням мінеральних компонентів, зокрема карбонатів і сульфатів. Такі процеси супроводжуються виділенням газоподібних продуктів та утворенням оксидних форм речовин.

Отримані результати свідчать про доцільність застосування поетапної термічної обробки шламових відходів. Встановлено, що температурний режим до 800 °С є достатнім для видалення води, деструкції органічних складників та часткового розкладу неорганічних компонентів. При цьому зниження температури обробки порівняно з раніше застосованими режимами дозволяє зменшити енергетичні витрати без зниження ефективності процесу.

Отримані результати можуть бути використані для розробки енергоефективних технологій утилізації шламових відходів. Застосування встановлених температурних режимів сприяє зменшенню енергетичних витрат і створює передумови для комплексної переробки відходів із вилученням цінних компонентів. Наведені дані розширюють сучасні уявлення про термічну поведінку шламових відходів та можуть бути використані для подальшого вдосконалення технологічних процесів їх утилізації [5].

Таким чином, результати термогравіметричного дослідження можуть слугувати науковим обґрунтуванням вибору технологічних параметрів комплексної переробки шламових відходів виробництва віскозного волокна та розробки екологічно безпечних і ресурсоефективних технологій їх утилізації.

Список використаних джерел

1. Нижниченко Я. Є. Управління відходами як фундаментальний елемент національної безпеки. *Здобутки економіки: перспективи та інновації*. 2024. № 11.
2. Tarasova T. V., Hubina V. H., Kvashuk L. P. та ін. *Промислові відходи України. Проблеми та шляхи їх вирішення*. Київ: Логос, 2011. 199 с.
3. Атамась Г. М., Столяренко Г. С. Фізико-хімічні властивості та кінетичні дослідження переробки цинковмісних шламів ВАТ «Черкаське хімволокно» як альтернативного джерела сировини для виробництва цинкового купоросу. *Питання хімії та хімічної технології*. 2008. № 3. С. 76–79.
4. Шафорост Ю. А., Галаган Р. Л., Король Я. Д., Лут О. А. Основи безвідходного перероблення шламових відходів ВАТ «Черкаське хімволокно». *Питання хімії та хімічної технології*. 2022. № 6. С.108–114. DOI: 10.32434/0321-4095-2022-145-6-108-114
5. Шафорост Ю. А., Жабковська О. А., Смаліус В. В., Галаган Р. Л., Беляєв А. М. Хіміко-технологічні основи утилізації шламових відходів виробництва віскозного волокна. *Науковий вісник Ужгородського університету. Серія «Хімія»*. 2025. Т. 54. № 2. С. 110–119. DOI: 10.24144/2414-0260.2025.2.110-119.

ВПЛИВ ЗЛИВОВИХ СТОКІВ НА ЗАБРУДНЕННЯ РІЧКОВИХ ВОД ПОВЕРХНЕВО-АКТИВНИМИ РЕЧОВИНАМИ

Галина Петрушина¹, Наталія Максимова²

¹Дніпровський державний аграрно-економічний університет

²ТОВ «ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ «МЕТІНВЕСТ ПОЛІТЕХНІКА»»

e-mail: petrushyna.h.o@dsau.dp.ua

Поверхнево-активні речовини (ПАР) широко використовують у побутових та промислових мийних засобах. На відміну від природних мийних компонентів, зокрема мила, які у жорсткій воді утворюють малорозчинні сполуки із солями кальцію, магнію та деяких інших металів, ПАР не втрачають своїх мийних властивостей навіть за таких умов. Основними джерелами надходження ПАР до природних водойм є побутові та промислові стічні води, стоки пралень і автомийок, а також змиви із сільськогосподарських територій. Найбільші концентрації цих речовин зазвичай виявляють у стоках, пов'язаних із процесами миття та прання. У таких водах переважають аніоноактивні та неіоногенні ПАР, які характеризуються низькою здатністю до природного розкладання [1]. Аніоноактивні ПАР (АПАР), представлені переважно солями сульфокислот і сірчано-кислих ефірів, у водному середовищі дисоціюють з утворенням негативно заряджених іонів. Неіоногенні ПАР (НПАР), навпаки, у воді не утворюють іонів і належать до стійких сполук, здатних накопичуватися в навколишньому середовищі. Потрапляючи до річкових екосистем, ПАР зменшують поверхневий натяг води, утворюючи на її поверхні плівку та стійку піну. Унаслідок цього погіршується розчинення кисню та сповільнюється газообмін між водою й атмосферою, що може спричиняти гіпоксію, загибель риб і безхребетних організмів, а також порушення співвідношення біомаси водоростей. Деякі НПАР здатні негативно впливати на ендокринну систему риб, знижуючи чисельність їх популяцій, а також накопичуватися в організмах риб, молюсків і донних безхребетних. Крім того, ПАР пригнічують активність бактерій та змінюють структуру мікробних угруповань, що знижує здатність водойм до самоочищення [2]. Вони також сприяють розчиненню гідрофобних сполук і перенесенню нафтопродуктів, пестицидів та важких металів, підвищуючи токсичність водного середовища і мобільність забруднювачів [2, 3].

Метою роботи було дослідження води з колектора зливових стоків у житловому масиві Перемога-3 м. Дніпро, а також води р. Дніпро у місці скиду цих стоків. Вміст АПАР і НПАР у воді визначали відповідно до ДСТУ ISO 7875-1 та ДСТУ ISO 7875-2. У річковій воді концентрація АПАР становить 0,12 мг/л, це значення не перевищує ГДК (0,5 мг/л [4, 5]), однак вміст НПАР становить 3,13, що є вищим за ГДК (0,1 мг/л [4, 5]) більш ніж у 30 разів. Концентрація АПАР у воді колектора становить 0,48 мг/л, що перебуває на межі допустимого рівня, тоді як вміст НПАР дорівнює 5,57, що перевищує встановлений норматив більш ніж у 50 разів.

Отримані результати свідчать про забруднення річкової води ПАР у зоні скиду стоків. Імовірною причиною підвищеного вмісту цих речовин у воді колектора є несанкціоноване надходження побутових та/або промислових стічних вод.

Список використаних джерел

1. Badmus S. O., Amusa H. K., Oyeohan T. A., Saleh T. A. *Env Sci Pollut Res Int.*, 2021, 28(44), 62085–62104.
2. Najim A. A., Radeef A. Y., J. of *Env. Engin. and Sci.*, 2024, 19 (3), 157–176.
3. Малько А. Наука і техніка сьогодні. 2023, 8 (22), 383-395.
4. Наказ МОНУ від 02.05.2022 № 721. Оновлення: 21.01.2025.
5. ДСанПітН 2.2.4-171-10. Наказ МОНУ від 12.05.2010 № 400. Оновлення від 17.01.2025.

РЕЦИКЛІНГ ОРГАНІЧНИХ ВІДХОДІВ ДОМОГОСПОДАРСТВ У БІОРОЗКЛАДНІ МАТЕРІАЛИ ЯК СТРАТЕГІЯ МІНІМІЗАЦІЇ ПЛАСТИКОВОГО ЗАБРУДНЕННЯ

Софія Коваленко, Ольга Тимошук

Приватний заклад загальної середньої освіти II-III ступенів «Гімназія А+»,

Дніпровського району, м. Києва

e-mail: kovalenko.s@academy.com.ua

Щороку мільйони тонн харчових відходів накопичуються на звалищах, стаючи джерелом екологічної небезпеки. Водночас зростає потреба у зменшенні використання нафтохімічного пластику. Дана робота пропонує інноваційне рішення в межах стратегії управління відходами: перетворення побутової органіки (від кавової гущі до шкірок овочів) на біорозкладні полімери. Це дозволяє впровадити принципи циклічної економіки, де побутові відходи стають цінною сировиною для виробництва екологічного пакування, суттєво зменшуючи антропогенний тиск на довкілля.

Мета дослідження: розробити та дослідити фізико-хімічні властивості біорозкладних матеріалів, створених на основі побутових харчових відходів, для зменшення пластикового забруднення та вирішення проблеми накопичення і переробки побутових відходів.

Виробництво біополімерів з харчових відходів є перспективною та екологічно чистою альтернативою традиційним полімерним матеріалам, виготовленим на основі нафтових ресурсів.

На першому етапі збирали харчові відходи, багаті на пектин, крохмаль і целюлозу – картопляне лушпиння, кавова гуща і яблучний жмих. Після збору, сировина очищується від непотрібних частин та подрібнюється для полегшення подальшої обробки.

Для отримання пектину сировину обробляють гарячою водою або розчином кислот (наприклад, лимонною кислотою), що дозволяє розчинити пектин з клітинних стінок фруктів. Потім суміш фільтрують для відділення твердої частини, і отриманий розчин пектину концентрують за допомогою випаровування води або осадження. На цьому етапі з'ясовується чистота пектину, і його подальше очищення може бути необхідним для досягнення високої якості. Після виділення пектину, його піддають процесу полімеризації для утворення біополімеру.

Для виділення крохмалю з харчових відходів, сировину замочують у воді або розчині луѓу. Після цього сировину піддають механічному або термічному обробленню, що дозволяє звільнити крохмаль від інших компонентів. Для подальшого перетворення крохмалю в біополімери, його піддають процесу гідролізу. Цей процес дозволяє отримати розчин глюкози, який буде використовуватися для синтезу полімеру. Отриману глюкозу піддають процесу поліконденсації або ферментації, щоб утворити біополімери.

Для виділення целюлози з харчових відходів, сировину замочують у воді, подрібнюють, а потім піддають хімічному процесу, відомому як лужна обробка або кислотне гідролізування. Сировина обробляється розчином луѓу (наприклад, натрій гідроксид), що дозволяє розкласти лігнін та геміцелюлозу, залишаючи чисту целюлозу. Целюлоза, що залишилася після цієї обробки, очищується від розчинених забруднень і отримує вигляд волокнистої маси, готової до подальшого використання. Для перетворення целюлози в біополімери її піддають процесу регідролізу.

Готові біополімери піддавали тестуванню для оцінки його міцності, стійкості до зовнішніх факторів та біорозкладності.

Експериментальна робота

1) Для дослідження було використано три типові фракції ПХВ, що різняться за основним хімічним складом:

1. Картопляне лушпиння (основний компонент – крохмаль).
2. Яблучний жмих (основний компонент – пектин).
3. Кавава гуща (основний компонент – целюлоза та лігнін).
4. Кісточки авокадо (основний компонент – крохмаль, лігнін та поліфеноли).

Всі три типи сировини були успішно перероблені в гомогенні гелі та висушені до стану полімерної плівки. Незважаючи на різницю у вихідній в'язкості (найвища – у крохмального гелю), кінцевий вихід твердого полімеру був порівняним, що свідчить про високу конверсійну ефективність методу.

2) Порівняльний аналіз фізичних характеристик отриманих полімерів виявив чітку залежність властивостей кінцевого матеріалу від хімічної природи вихідної органічної сировини. Зокрема, біоматеріали на основі крохмалю з картопляного лушпиння продемонстрували найбільшу пластичність та можливість до розтягування, що є критичним для пакувальних плівок. На противагу цьому, зразки, виготовлені з кавової гущі, мали підвищену жорсткість і міцність на вигин.

3) Швидкість розкладання залежала від хімічної стійкості полімерної основи:

Біополімер з картопляного лушпиння повністю розклався через 4 тижні.

Біополімер з яблучного жмиху повністю розклався через 8 тижнів.

Біополімер з кавової гущі повністю розклався через 12 тижнів.

Біополімер з кісточок авокадо повністю розклався через 10 тижнів.

4) За результатами розрахунків відносного приросту маси після 24-годинної експозиції у водному середовищі, зразки було ранжовано за ступенем вологостійкості: кавовий біопластик (28 %) < змішаний композит (62 %) < пектиновий полімер (84 %) < крохмальний зразок (130 %).

Висновки

1. Доведено можливість повної утилізації поширених харчових відходів шляхом їх переробки у функціональні біополімерні матеріали.

2. Експериментально підтверджено, що створені матеріали повністю розкладаються у ґрунті протягом короткого терміну (від 4 до 12 тижнів залежно від складу), не утворюючи токсичного мікропластику.

3. Встановлено, що використання різних типів відходів дозволяє програмувати властивості кінцевого продукту.

4. Запропонована технологія сприяє зменшенню викидів метану на сміттєзвалищах (через вилучення органіки) та пропонує готову модель циклічного виробництва («відходи → матеріал → біогумус»), що є стратегічно важливим для сталого розвитку територіальних громад.

Можливості практичного застосування

1. Розроблена технологія дозволяє створювати біорозкладні аналоги одноразового пластику.

2. Створення малих майстерень з переробки зібраних харчових відходів на сувенірну продукцію або побутові дрібниці допоможе зменшити обсяги вивезення сміття на полігони та заощадити кошти громади.

3. Кав'ярні можуть використовувати власну використану кавову гущу для виготовлення брендованих підставок під гаряче, тримачів для стаканів або навіть самих горняток.

4. Використання біополімерних контейнерів для розсади.

5. Результати дослідження можуть стати основою для місцевих програм із глибокого сортування відходів.

Список використаних джерел

1. Abe M. M, Martins J. R., Sanvezzo P. B., Macedo J. V. *et al.* (2021) Advantages and disadvantages of bioplastics production from starch and lignocellulosic components *Polymers* 13:2484. URL: <https://doi.org/10.3390/polym13152484>.

2. Ana M. Díez-Pascual. Biopolymer Composites: Synthesis, Properties, and Applications. *Int. J. Mol. Sci.* 2022, 23(4), 2257. URL: <https://doi.org/10.3390/ijms23042257>.

3. de Amorim J. P., de Souza K. C., Duarte C. R., da Silva D.I., *et al.* (2020) Plant and bacterial nanocellulose: production, properties and applications in medicine, food, cosmetics, electronics and engineering. A review. *Environ Chem Lett* 18:851–869. URL: <https://doi.org/10.1007/s10311-020-00989-9>.

4. Hopewell J., Dvorak R., Kosior E. (2009, July 27). Plastics recycling: challenges and opportunities April 5, 2017. URL: <https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC2873020/>.

5. Vishal Gavande, Vasi Shaikh and Won-Ki Lee. Biopolymers and Biodegradable Polymers: Synthesis, Properties, Application and Degradation Behavior. URL: <https://doi.org/10.3390/books978-3-7258-3859-2>.

ПЕРСПЕКТИВА ВИКОРИСТАННЯ МОДИФІКОВАНИХ ПРИРОДНИХ СОРБЕНТІВ ДЛЯ ВИЛУЧЕННЯ БІОГЕННИХ КОМПОНЕНТІВ ІЗ СТИЧНИХ ВОД

Людмила Ящук

Черкаський державний технологічний університет

e-mail: l.yashchuk@chdtu.edu.ua

Актуальною проблемою сьогодення є екологічна безпека водного середовища, яка вимагає ефективного вилучення біогенних елементів, що масово потрапляють у водойми внаслідок господарської діяльності. Негативний вплив накопичених компонентів полягає у зниженні поверхневого натягу води та зменшенні вмісту кисню. Утворюючи разом із нафтопродуктами щільну поверхневу плівку, невилучені біогени блокують газообмін, що веде до деградації флори та загибелі фауни водойм [1].

Перспективними на даний час методами вилучення фосфатів із природних і промислових стоків є хімічне осадження та сорбція із застосуванням ефективних сорбційних матеріалів. Оскільки результат очищення безпосередньо залежить від природи забруднювача, напрямком розвитку цієї технології є штучна модифікація сорбентів, що дозволяє більшити їхню сорбційну здатність. Саме цілеспрямована зміна структури та функціональних груп поверхні матеріалу забезпечує його надвисоку ємність щодо фосфат-іонів, гарантуючи при цьому тривалий час роботи та хімічну інертність у процесі водоочищення [2].

Природні сорбенти вже показали свою ефективність для видалення фосфатів із стічних вод, тому для підвищення ступеня вилучення біогенних компонентів було модифіковано сорбенти природного походження (верховий торф, буре вугілля) за допомогою композиту шлаку, який утворюється при спалюванні вугілля на ТЕЦ.

Для кількісного визначення вмісту фосфат-іонів у воді використовувався фотометричний метод із застосуванням амоній молібдату $(\text{NH}_4)_2\text{MoO}_4$.

Дослідження сорбційної здатності обраних сорбентів та їх модифікованих композицій здійснювалося в статичних умовах, при співвідношенні сорбент/вода 1:10. Результати дослідження наведені в таблиці.

Таблиця.

Ступінь вилучення фосфат-іонів з води за допомогою модифікованих сорбентів

Модифікований сорбент	Ступінь вилучення, %		
	0 годин	1 година	20 годин
Вугілля	20,69	22,83	27,58
Вугілля + 2 % шлак	13,79	26,09	34,48
Вугілля + 10 шлак	17,24	10,34	24,13
Верховий торф	20,09	20,83	17,84
Верховий торф + 2 % шлак	20,63	10,34	20,68
Верховий торф + 10 % шлак	26,03	20,83	20,68

Дослідження сорбційної здатності запропонованих матеріалів щодо вилучення фосфат-іонів з водного середовища виявило найвищу ефективність у комбінації бурого вугілля з 2 % шлаку. Цей композит продемонстрував найбільшу сорбційну ємність, яка становила 26 % через 1 годину та зросла до 34,5 % через 20 годин контакту, а також найкращі показники поглинання фосфат-іонів на одиницю сорбенту (0,015 та 0,030 мг/дм³ відповідно). Натомість чисте буре вугілля досягало свого максимуму (26,7 %) лише на завершення експерименту.

Модифікація верхового торфу виявилася неефективною, оскільки збільшення часу його контакту з водою призводило до небажаного забарвлення сорбату гуміновими компонентами.

Загалом, використання зазначених сорбентів та їхніх композицій є перспективним екологічним рішенням, що дозволяє ефективно очищувати воду за допомогою безпечних природних речовин та одночасно утилізувати промислові відходи.

Отримані результати досліджень свідчать про високу ефективність модифікованих сорбентів. при видаленні фосфат-іонів із стічних вод. Модифікування сорбентів спрямоване на покращення їхніх рівноважно-кінетичних показників, що виражається у підвищенні граничної ємності сорбції та інтенсифікації часу встановлення рівноваги.

Список використаних джерел

1. Мацуська О., Сухорська О. Порівняльний аналіз ефективності вилучення фосфатів із водного середовища природними сорбентами. *Екологічні науки*. 2020. Т. 5 : 32. С. 153–158.

URL: <https://doi.org/10.32846/2306-9716/2020.eco.5-32.22>.

2. Хохотва О. П. Використання композиційного сорбенту цеоліт-гумінові кислоти для вилучення іонів міді з водних розчинів / О. П. Хохотва, О. І. Кондратенко, К. О. Шкель // Вісник НТУ «ХП». Нові рішення в сучасних технологіях. – 2016. – № 18 (1102). С. 180–185.

МОНІТОРИНГ ВМІСТУ КОФЕЇНУ В РІЗНИХ ВИДАХ ЧАЮ МЕТОДОМ УФ-СПЕКТРОФОТОМЕТРІЇ

Соф'я Мукомела, Олег Погребняк

Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького

e-mail: mukomela.sofia2222@vu.cdu.edu.ua

Чай є одним із найпоширеніших напоїв у світі. Ключовим біологічно активним компонентом чаю є кофеїн – алкалоїд пуринового ряду, який стимулює центральну нервову систему, підвищує розумову та фізичну працездатність. Причому вміст кофеїну в чайній продукції може значно варіювати залежно від виду сировини, умов обробки, способу заварювання та інших факторів. Враховуючи значну різноманітність представлених на ринку видів чаю, що відрізняються технологією обробки та походженням сировини, питання моніторингу фактичного вмісту кофеїну є надзвичайно важливим для забезпечення безпеки споживання та контролю якості продукції.

Серед сучасних методів аналізу кофеїну широко застосовуються хроматографічні та спектрофотометричні методи. Незважаючи на високу точність хроматографії, вона потребує складного обладнання та значних витрат. Натомість УФ-спектрофотометрія є більш доступною, швидкою та економічно доцільною, що робить її перспективною для рутинного аналізу та навчальних досліджень. У зв'язку з цим актуальним є вдосконалення методики визначення кофеїну в різних видах чаю з використанням УФ-спектрофотометрії.

Метою роботи є встановлення кількісного вмісту кофеїну в різних видах чаю методом УФ-спектрофотометрії та оптимізації умов пробопідготовки та аналізу.

Для проведення кількісного аналізу було використано наступне обладнання: ваги лабораторні SF-400C, спектрофотометр MAPADA UV-1600 з кварцовими кюветами ($l = 1$ см), лабораторний механічний струшувач, чайник електричний та ділильна лійка.

Для підготовки стандартного розчину кофеїну з концентрацією 1 мг/мл як вихідну сировину використовували фармацевтичний препарат «Кофеїн-бензоат натрію» у формі розчину для ін'єкцій із номінальною концентрацією діючої речовини 100 мг/мл. Екстракцію кофеїну проводили дихлорметаном (вміст $\text{CH}_2\text{Cl}_2 \geq 99,8\%$, що містить аміден як стабілізатор). Для проведення кількісного аналізу було використано зразки чорного та зеленого чаю у листовій та пакетованій формі різних торгових марок.

Побудову градувального графіка проводили за серією стандартних розчинів кофеїну в діапазоні концентрацій від 5 до 100 мг/л шляхом послідовного розведення розчину для ін'єкцій кофеїн-бензоату натрію. Приготовлені робочі розчини з точно відомим вмістом аналіту, піддавали екстракції 10 мл розчину дихлорметану, струшували на лабораторному шейкері протягом 5 хвилин. Після розшарування фаз розчин переносили у ділильну лійку і зливали нижній органічний шар, який використовували для подальшого вимірювання на спектрофотометрі з використанням чистого розчину дихлорметану як розчину порівняння.

У результаті було отримано УФ-спектри стандартних розчинів алкалоїду на основі яких побудували градувальний графік для визначення вмісту кофеїну. За допомогою програми *OriginPro 8E* було проведено розрахунок довірчих інтервалів отриманих результатів та виведено математичний зв'язок між аналітичним сигналом та концентрацією кофеїну в екстракті у вигляді лінійного рівняння:

$$A_{290} = (0,2017 \pm 0,0180) + (0,0136 \pm 0,0004) \cdot C(\text{кофеїну}), \text{ мг/л.}$$

Межа виявлення, розрахована за 3s-критерієм, становить 3,95 мг/л, а коефіцієнт кореляції склав 0,9957 ($n = 8$). Діапазон лінійності градувального графіка знаходиться в межах 5,0 – 100,0 мг/л.

Підготовку робочих розчинів чаю здійснювали наступним чином: наважку досліджуваного зразка чайного листа масою 500 мг поміщали у термічно стійкий хімічний стакан на 250 мл та додавали до нього 100 мл киплячої дистильованої води. Отриманий розчин охолоджували протягом 5 хвилин і фільтрували, після чого кількісно переносили у конічну колбу з притертою пробкою ємністю 250 мл. Для екстракції до розчину додавали 10 мл розчину дихлорметану, щільно закривали колбу пробкою і ставили струшувати на механічну мішалку протягом 5 хвилин. Для швидшого руйнування емульсії органічної фази до розчину додавали наважку хімічно чистого натрій хлориду масою 1 г [3]. Після повного розшарування фаз розчин переносили у ділілну лійку і зливали нижній органічний шар, який використовують для подальшого спектрофотометричного аналізу з використанням чистого розчину дихлорметану як розчину порівняння.

У результаті вимірювань і подальших обрахунків було встановлено вміст кофеїну у семи досліджуваних зразках чайної сировини (табл. 2).

Таблиця 2.

Вміст кофеїну у досліджуваних зразках чайної сировини

№ зразка	Вид чаю	Форма	Вміст кофеїну, мг/г
1	чорний	листова	13,79
2	зелений	листова	12,24
3	чорний	листова	15,72
4	зелений	листова	14,58
5	зелений	листова	11,97
6	чорний	пакетована	18,50
7	зелений	пакетована	16,02

Аналіз експериментальних даних дозволяє виявити певну залежність концентрації кофеїну в отриманих водних екстрактах від ступеня подрібнення досліджуваної сировини. Встановлено, що зразки пакетованого чаю характеризуються вищим середнім вмістом кофеїну у розчині (16,02–18,50 мг/г) порівняно із листовими аналогами (11,97–15,72 мг/г), незважаючи на ідентичні умови заварювання. Зазначена закономірність пояснюється тим, що швидкість масопереносу у розчині прямопропорційно залежить від площі поверхні розділу фаз. Відповідно, висока дисперсність пакетованої форми забезпечує інтенсивнішу дифузію алкалоїду в об'єм розчинника, порівняно з листовою формою сировини.

Таким чином, отримані результати коректно відображають реальний вміст «доступного» кофеїну, який переходить у чайний напій за стандартних умов побутового приготування, та підтверджують суттєвий вплив фактора дисперсності сировини на ефективність вилучення кофеїну.

Список використаних джерел

1. Zhukovetska O. Solvatochromic properties of some 6,7-dihydroxybenzopyryllium perchlorate derivatives. Ukrainian Chemistry Journal. 2023. Vol. 89, №. 8. P. 117–126.
2. Absorption of uv rays by caffeine solution in various solvents / Z. Abdija et al. JNSM - journal of natural sciences and mathematics of UT. 2025. Vol. 10, no. 19-20. P. 230–243.
3. Raynie D. E. Enhancing extractions by salting out. LCGC north america. 2023. P. 262–265.

СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧНЕ ВИЗНАЧЕННЯ ЙОДАТІВ В ЙОДОВАНІЙ СОЛІ 2-БРОМО-N,N-ДИМЕТИЛАЛАНІНОМ

Юлія Литвин, Олег Погребняк

Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького

e-mail: lytvyn.yuliia2222@vu.edu.ua

Йод є життєво необхідним мікроелементом, що забезпечує біологічні процеси в організмах людей і тварин. Найбагатшими природними резервуарами цього елемента є підземні мінералізовані води, поклади солей та морська біомаса (зокрема водорості). На сьогодні йодовмісні речовини знайшли масове застосування у фармакологічній індустрії, охороні здоров'я, агросекторі, харчових технологіях та під час створення новітніх композитів.

Ключова ендокринна роль елемента полягає у забезпеченні секреторної функції щитоподібної залози. Він слугує базовим компонентом для вироблення гормонів, відповідальних за метаболізм та коректний ріст організму. Оскільки дефіцит йоду провокує тяжкі ендемічні патології, загальноприйнятою практикою стало штучне збагачення ним повсякденних продуктів, насамперед кухонної солі.

Оскільки основним фортифікатором виступають йодати, виникає потреба у надійних і швидких способах їхнього кількісного аналізу. Найбільш перспективними для серійних вимірювань є спектрофотометричні (СФ) методи завдяки їхній високій чутливості, простому апаратному рішенню та мінімальним затратам часу на аналіз.

Отже, потреба у вдосконаленні СФ методів визначення йоду, зокрема йодатів, за допомогою яких проводиться йодування продуктів, має важливе значення для забезпечення належного контролю за рівнем цього елемента в різних середовищах, зокрема в харчових продуктах, воді та біологічних рідинах є актуальною.

Спектрофотометричні дослідження виконували на приладі Mapada UV-1200 із кварцовими кюветами довжиною оптичного шляху 1,0 см. Спектри реєстрували з кроком 5 нм. Холостий розчин містив 2-бром-ДМА та дистильовану воду у співвідношенні 1:1.

Взаємодія N,N-діетиланіліну (ДЕА) та 2-бromo-N,N-диметиланіліну (2-Br-ДМА) за присутності надлишку бромід-іонів у розчині сульфатної кислоти супроводжується утворенням, продуктів, що поглинають в УФ спектральному діапазоні. Цей факт було використано для СФ визначення йодатів і періодатів ДЕА [1–2] та броматів ДЕА і 2-Br-ДМА [3–4].

Метою даної роботи є розроблення СФ методики визначення йодатів за присутності надлишку Br⁻-іонів із використанням 2-Br-ДМА як аналітичного реагенту та проаналізувати зразки йодованої солі, що були придбані у роздрібній мережі магазинів в м. Черкаси.

В результаті досліджень встановлено оптимальний час нагрівання реакційної суміші до температури 65–70 °С для окиснення (бромовання) 2-Br-ДМА, який склав 5 хвилин.

За оптимального часу нагрівання кількість утвореного 2,4-дибром-ДМА, а отже, і світлопоглинання розчину, залежить від концентрації окисника, що дає змогу кількісно визначати ІО₃⁻-іони методом градуального графіка.

Для зручності подальшого визначення йоду в йодованій солі завчасно перераховували концентрацію йоду в п · 10⁻⁴ %. Рівняння градуального графіка має вигляд (R² = 0,9975; n = 7):

$$\Delta A_{290} = (0,0273 \pm 0,0101) + (0,0150 \pm 0,0003) \cdot W(\text{йоду} \cdot 10^{-4} \%).$$

Межа виявлення йоду, розрахована за 3s-критерієм, становить $2 \cdot 10^{-4} \%$. Лінійність ГТ зберігається в інтервалі $(2-65) \cdot 10^{-4} \%$.

З метою перевірки достовірності запропонованої методики та моніторингу наявної в продовольчій мережі м. Черкаси йодованої солі було проведено аналіз придбаних зразків на вміст йоду. СФ визначення йодатів у зразках йодованої солі проводили наступним чином. Наважку йодованої солі масою 5,000 г кількісно переносили у мірну колбу ємністю 25,0 мл, розчиняли у дистильованій воді, доводили до мітки та перемішували. При необхідності розчин фільтрували. В хімічному стакані до 2,0 мл одержаного розчину солі додавали такий же об'єм «змішаного» реактиву (ЗР) [4] і нагрівали 5 хвилин до температури 65–70 °С. Суміш охолоджували впродовж 10 хв за кімнатної температури і вимірювали оптичну густину у кюветі товщиною 1,0 см при 290 нм. Як розчин порівняння використовують суміш ЗР та розчину NaCl (0,2 г/мл) у співвідношенні 1:1.

Для порівняння результатів, отриманих за запропованою нами методикою, проводили йодометричне визначення вмісту йоду в йодованій солі згідно [5]. Результати таких досліджень наведено у таблиці.

Таблиця

Результати аналізу зразків йодованої солі різних виробників України

№ за/п	Ціна, грн	Стандартна методика [5]	Розроблена методика	Співвідношення вміст йоду/ціна
		Вміст йоду, 10 ⁻⁴ %		
1	23,32	19,0	18,5	0,82
2	15,60	6,35	5,8	0,41
3	26,90	21,1	20,7	0,78
4	21,10	34,2	35,0	1,62
5	65,99	31,8	32,4	0,48

* Зразки були придбані у травні 2026 р. у м. Черкаси.

З таблиці видно, що вміст йоду в зразках йодованої солі, що були проаналізовані, не завжди відповідає ДСТУ 4886.9:2007 (це зразки 1–3), відповідно до якого масова частка йоду має бути в межах $(25 - 55) \cdot 10^{-4} \%$. За співвідношенням (вміст йоду/ціна) найкращим виявився зразок 4.

За даними, наведеними в таблиці, можна зробити висновок, що результати СФ та титриметричного аналізу мають співмірні значення. Отже, розроблена методика може бути рекомендована як альтернативна для контролю вмісту йоду в йодованій солі.

Список використаних джерел

3. Запорожець О. А., Погребняк О. С., Візір М. М. Спектрофотометричне визначення йодатів у кухонній солі N,N-діетиланіліном. Питання хімії і хімічної технології. 2009. № 6. С. 77–83.

4. Погребняк О. С. Спектрофотометричне визначення періодатів N,N-діетиланіліном. Вісник Черкаського Університету. Серія Хімічні Науки. 2014. Т. 307. № 14. С. 3–8.

5. Запорожець О. А., Погребняк О. С., Візір М. М. Спектрофотометричне визначення броматів(V) N,N-діетиланіліном. Методи і об'єкти хімічного аналізу. 2009. Т. 4, № 1. С. 48–55.

6. Погребняк О. С., Мінаєв Б. П., Шевченко О. П., Лут О. А. Спектрофотометричне визначення броматів 2-бromo-N,N-діметиланіліном. Питання хімії та хімічної технології. 2021. №2. С. 104–109.

7. ДСТУ 4886.9:2007. Сіль кухонна. Визначення вмісту йоду. Чинний від 2009-01-01. Київ : Держспоживстандарт України, 2008. 10 с.

СЕКЦІЯ 7. АГРАРНА НАУКА І ОСВІТА В ХХІ СТОЛІТТІ: ПРОБЛЕМИ, ПЕРСПЕКТИВИ ТА ІННОВАЦІЇ

СИНТЕЗ ЦИНК ГЛІЦИНАТУ ДЛЯ ІНКРУСТАЦІЇ КУКУРУДЗИ

Галина Петрушина, Сергій Крамарьов

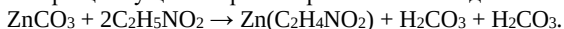
Дніпровський державний аграрно-економічний університет

e-mail: petrushyna.h.o@dsau.dp.ua

Амінокислоти широко використовуються для стимуляції росту сільськогосподарських культур у всьому світі [1]. Вони не лише забезпечують рослини доступними поживними речовинами, але й покращують якість рослин, що призводить до підвищення врожайності [2]. Застосування амінокислот впливає на фізіологічну активність рослин кукурудзи, особливо в умовах абіотичних стресів [3]. Крім того, амінокислоти посилюють антиоксидантний метаболізм, мають хелатуючі властивості, які у поєднанні з мікроелементами полегшують поглинання та транспортування останніх у рослинах [4].

Наявність цинку в насінні також покращує проростання в умовах абіотичного стресу [5]. Цинк є важливим мікроелементом, який у невеликих концентраціях є необхідним для росту та розвитку рослин [6]. Хоча нормальний діапазон концентрації цинку становить близько 25–150 мг/кг, він відіграє життєво важливу роль у більш ніж 300 ферментах [7]. Дефіцит цинку в ґрунті корелює з більш високим потенціалом водню (pH), солоністю, підвищеною інтенсивністю водного стресу, наявністю кальцію та бікарбонатів, заболочуванням, інтенсивним сільським господарством та підвищеним споживанням поживних речовин [8]. Цинк відіграє важливу роль у водному балансі рослин, стабільності клітинної мембрани, утворенні хлорофілу, накопиченні осмолітів, у фотосинтезі, що призводить до поліпшення росту рослин, і як наслідок – до збільшення врожайності [9].

Для дослідження впливу цинку на пророщування кукурудзи був синтезований цинк гліцинат за наступною методикою. До цинк карбонату при перемішуванні був доданий розчин гліцину в еквівалентній кількості. Суміш перемішували при температурі 50 °C протягом 20 хвилин. При цьому цинк карбонат розчинився з виділенням газу:



З розчину сіль цинк гліцинату виділили випаровуванням. Вихід продукту становив 99,98 %. Гравіметричним методом визначили вміст кристалізаційної води – на одну молекулу солі припадає 2 молекули води $\text{Zn}(\text{C}_2\text{H}_4\text{NO}_2) \cdot \text{H}_2\text{O}$.

Для підтвердження складу синтезованої речовини отримали ІЧ-спектр, на якому наявні характеристичні смуги коливання для комплексів металів з амінокислотами [10] та відсутні сильні вузькі смуги валентних коливань вільних ОН-груп в області 3650–3590 cm^{-1} внаслідок утворення ковалентних зв'язків з центральним атомом.

Список використаних джерел

1. G. Colla, S. Nardi, M. Cardarelli, A. Ertani, L. Lucini, R. Canaguier, Y. Roupheal, ScientiaHortic., 2015, 196, 28–38.
2. M. K. Souri, Open Agric., 2016, 1, 118–123.
3. M. S. Sadak, B. A. Bakry, T. M. Abdel-Razik, R. S. Hanafy, Braz. J. Biol., 2023, 83, e256338.

4. A. M. S. Elshamly, R. Iqbal, B. Ali, I. Ahmed, M. I. Akram, S. Ali, A. Ditta, F. Çığ, M. S. Elshikh, A. E.-Z. M. A. Mustafa, M. H. Hamed, Rhizosphere, 2024, 29, 100820.
5. M. R. Rafie, H. N. Badi, A. Mehrafarin, A. Qaderi, N. Zarinpanjeh, A. Sekara, E. Zand. Scientia Hort., 2017, 216, 160–168.
6. A. U. Jan, F. Hadi, A. Ditta, M. Suleman, M. Ullah, Environ. Exp. Bot., 2022, 193, 104682.
7. M. Solanki, J. Microbiol. Biotechnol. Food Sci., 2021, 11.
8. Z. Karimian, L. Samiei, Front. Plant Sci., 2023, 14, 1063618.
9. C. Kaya, D. Higgs. Scientia Hort., 2002, 93, 53–64.
10. S. Zabihzadeh, C. Ionescu, S. Biselli, A. Blanchard, O. Sereda, Results in Chem., 2024, 7, 101457.

ОЦІНКА ВМІСТУ ВАЖКИХ МЕТАЛІВ У ҐРУНТАХ ТЕРИТОРІЙ ВІЙСЬКОВИХ НАВЧАНЬ ЧЕРКАСЬКОЇ ОБЛАСТІ

Юлія Шафорост, Олег Погребняк, Олександр Шевченко

Черкаський національний університет

імені Богдана Хмельницького

e-mail: ZdorYulia@ukr.net

Військові конфлікти та навчання супроводжуються значним антропогенним навантаженням на природні екосистеми [1, 2]. Одним із найбільш уразливих компонентів довкілля є ґрунтовий покрив, який зазнає механічного руйнування та хімічного забруднення внаслідок вибухів боєприпасів, використання військової техніки та накопичення продуктів згорання вибухових речовин. Особливої актуальності проблема набула в умовах російсько-української війни, коли значні площі земель піддаються впливу військово-техногенних чинників.

Метою дослідження була оцінка рівня забруднення ґрунтів території військового полігону Черкаської області важкими металами та визначення окремих агрохімічних показників ґрунту.

Відбір проб ґрунту проводили навесні 2023 року на території військового об'єкта в Черкаській області. Зразки відбирали у вирвах від вибухів мін калібру 82 та 120 мм, на периферії вирв, а також на ділянці полігону поза зоною активних військових навчань. Вміст важких металів визначали методом атомно-емісійної спектроскопії з індуктивно зв'язаною плазмою, а елементний склад ґрунтів досліджували методом рентгенофлуоресцентного аналізу. Аналіз ґрунту на вміст шкідливих речовин та важких металів є невід'ємною частиною оцінки якості ґрунту та вивчення його аграрних можливостей. Значний вплив на хімічний склад ґрунтів здійснює антропогенна діяльність, пов'язана з розвитком промисловості, транспорту та накопиченням відходів.

Автори [3] зазначають, що негативний вплив на навколишнє середовище не обмежується лише утворенням значних обсягів сміття та відходів. Він також пов'язаний із викидами небезпечних речовин, зокрема азбесту, промислових хімікатів і паливних матеріалів, які потрапляють у ґрунт, водні об'єкти та атмосферне повітря, спричиняючи їх забруднення і токсичний вплив на екосистеми. У зв'язку з цим важливого значення набувають сучасні методи контролю екологічного стану ґрунтів. Одним із таких методів є рентгенофлуоресцентний елементний аналіз, який зарекомендував себе як ефективний і надійний інструмент для визначення вмісту важких металів. Метод забезпечує отримання

повної та достовірної інформації про елементний склад речовин незалежно від їх походження та агрегатного стану за відносно короткий час.

Результати дослідження показали, що перевищення гранично допустимих концентрацій міді, свинцю, цинку та марганцю у досліджених зразках не виявлено. Водночас максимальний вміст свинцю у зразках із місць вибухів досягав 5,9 мг/кг, що наближається до встановленої гранично допустимої концентрації та потребує подальшого моніторингу. Найвищий вміст марганцю становив 20,1 мг/кг у ґрунті поблизу вибухових виврв, тоді як на контрольній ділянці цей показник був нижчим.

Рентгенофлуоресцентний аналіз засвідчив підвищений вміст заліза, що може бути пов'язано із залишками металевих елементів боєприпасів та продуктами їх руйнування (рис.). Також у ґрунтах виявлено кремній, кальцій, калій, титан, ванадій та інші елементи. Зокрема, сплави на основі титану з добавками ванадію застосовуються в авіаційній і ракетній техніці.

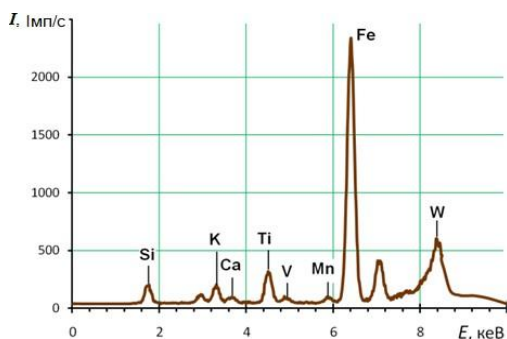


Рис. Спектр рентгенівської флуоресценції ґрунту (зразок № 2)

Встановлено, що ґрунти в місцях проведення військових навчань мають кислу реакцію середовища (рН 3,8–4,2), тоді як на контрольній ділянці значення рН становило 6,2. Крім того, досліджені зразки характеризувалися низьким вмістом доступних форм азоту, калію, сірки та бору, що свідчить про погіршення показників родючості ґрунту (табл.).

Таблиця

Фізико-хімічні властивості ґрунту військового полігону

Досліджувані зразки	рН	Рухомі форми, мг/кг ґрунту				
		N	P ₂ O ₅	K ₂ O	B	S
Зразок № 1	4,1	63,5	68,5	41	0,059	< 1,5
Зразок № 2	4,2	64,5	69,8	41	0,058	< 1,5
Зразок № 3	4,0	45	48	52	0,058	< 1,5
Зразок № 4	3,8	47	51	51	0,057	< 1,5
Зразок № 4	6,2	64	70,1	57	0,060	< 1,5

Аналіз рухомих форм поживних елементів показав зниження вмісту азоту, калію, сірки та бору в ґрунтах зон військових навчань порівняно з контрольною ділянкою. Такі зміни можуть бути наслідком впливу вибухових речовин та свідчать про погіршення агрохімічних показників і зниження потенційної родючості ґрунтів.

Отримані результати свідчать про наявність помірного військово-техногенного навантаження на ґрунти полігону. Незважаючи на відсутність перевищення нормативів за більшістю важких металів, зміни кислотності та зниження вмісту поживних елементів можуть негативно впливати на екологічний стан території та процеси природного відновлення ґрунтового покриву. Подальший моніторинг таких територій є необхідною умовою забезпечення екологічної безпеки та розроблення заходів щодо рекультивації земель.

Список використаних джерел

1. Skalny A. V., Aschner M., Bobrovitsky I. P., Chen P., Tsatsakis A., Paoliello M. M., Djordjevic A. B., Tinkov A. A. (2021). Environmental and health hazards of military metal pollution. *Environmental Research*, 201. 111568. doi: 10.1016/j.envres.2021.111568.
2. McNutt M., Hildebrand J. (2022). Scientists in the line of fire. *Science*, 375(6585). 1071. doi:10.1126/science.abp8817.
3. Shaforost Yu. A., Galagan R. L., Korol Ya. D., Lut, O. A. (2022). Basics of waste-free processing of sludge waste from «Cherkasy Khimvolokno» chemical plant. *Voprosy Khimii i Khimicheskoi Tekhnologii*, № 6, 108-114. doi: 10.32434/0321-4095-2022-145-6-108-114.

БІОІНДИКАЦІЙНА ОЦІНКА ФІТОТОКСИЧНОСТІ ҐРУНТІВ ТЕРИТОРІЙ ВІЙСЬКОВИХ НАВЧАНЬ ЧЕРКАСЬКОЇ ОБЛАСТІ

Вероніка Шкута, Юлія Шафорост

Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького
e-mail: ZdorYulia@ukr.net

Військова діяльність належить до чинників антропогенного впливу, що можуть спричинити порушення фізико-хімічних властивостей ґрунтів та накопичення в них продуктів руйнування боєприпасів, важких металів і залишків вибухових речовин. В умовах російсько-української війни проблема оцінювання екологічного стану територій, які зазнають військово-техногенного навантаження, набуває особливої актуальності. Важливим аспектом таких досліджень є не лише визначення концентрацій забруднювачів у ґрунті, а й оцінювання їхнього сумарного біологічного впливу на живі організми.

Одним із ефективних підходів до оцінювання екологічного стану ґрунтів є біотестування з використанням рослинних тест-об'єктів [1, 2]. Метод дозволяє встановити інтегральний вплив комплексу забруднювачів на ріст і розвиток рослин та врахувати можливі синергічні ефекти між окремими компонентами забруднення [3]. Як тест-об'єкт у дослідженні використано цибулю городню (*Allium cepa* L.), яка характеризується високою чутливістю до змін якості ґрунтового середовища та широко застосовується в екоотоксикологічних дослідженнях.

Метою роботи було оцінити фітотоксичність ґрунтів із територій військових навчань Черкаської області за допомогою біоіндикаційного тесту з використанням цибулі городньої *Allium cepa* L. та встановити можливий зв'язок між токсичністю ґрунту і вмістом важких металів.

Для дослідження використовували зразки ґрунту, відібрані на території військового полігону Черкаської області в місцях проведення навчань, а також на контрольній ділянці поза зоною активного військового впливу. Попередні хімічні дослідження показали

наявність підвищеного вмісту заліза, свинцю та марганцю порівняно з фоновими значеннями, хоча перевищення гранично допустимих концентрацій не було виявлено [4].

Для кількісної оцінки токсичного впливу досліджуваних ґрунтів визначали фітотоксичний ефект (ФЕ), який характеризує ступінь пригнічення ростових показників тест-рослин порівняно з контролем. Розрахунок здійснювали на основі морфометричних параметрів рослин, зокрема довжини кореневої системи. Значення фітотоксичного ефекту визначали за формулою:

$$\text{ФЕ} = \frac{M_o - M_x}{M_o} \cdot 100 \%,$$

де ФЕ – фітотоксичний ефект, %; M_o – значення морфометричного показника у контрольному варіанті; M_x – значення відповідного показника у дослідному варіанті.

Оцінювання рівня токсичності ґрунту здійснювали за величиною фітотоксичного ефекту (ФЕ), який характеризує ступінь пригнічення росту кореневої системи тест-об'єкта порівняно з контролем. Значення ФЕ до 20 % свідчили про відсутність або слабо виражену токсичну дію. Інтервал від 20 до 40 % відповідав середньому рівню токсичності. За значень 40–60 % токсичність оцінювали як підвищену, 60–80 % – як високу, а при перевищенні 80 % – як дуже високу, що вказувало на значне пригнічення ростових процесів рослин.

Оцінку фітотоксичності проводили методом пророщування цибулин *Allium cepa* L. у водних витяжках ґрунту протягом 72 годин за кімнатної температури. Як контроль використовували дистильовану воду. Після завершення експозиції визначали середню довжину коренів тест-об'єкта та розраховували фітотоксичний ефект за ступенем інгібування їх росту порівняно з контролем.

Результати досліджень показали, що середня довжина коренів у контрольному варіанті становила 11,8 мм. Для зразків ґрунту, відібраних у місцях проведення військових навчань, цей показник знижувався до 9,8–10,6 мм, тоді як для контрольної ділянки становив 11,2 мм. Розрахований фітотоксичний ефект для ґрунтів вибухових вивр перебував у межах 10,2–16,9 %, що відповідає слабкому рівню токсичності. Для контрольної зразка значення фітотоксичного ефекту не перевищувало 5,1 %.

Отримані результати свідчать про незначне пригнічення ростових процесів тест-об'єкта під впливом компонентів ґрунтових витяжок із територій військових навчань. Найбільше зменшення довжини кореневої системи спостерігалось у зразках, відібраних безпосередньо з вибухових вивр, що може бути пов'язано з локальним накопиченням рухомих форм металів та зміною фізико-хімічних властивостей ґрунту. Встановлене раніше підкислення ґрунтів (рН 3,8–4,2) могло сприяти підвищенню біодоступності окремих елементів і посиленню їх впливу на ріст рослин.

Таким чином, біоіндикаційне тестування виявило слабку фітотоксичність ґрунтів територій військових навчань Черкаської області. Незважаючи на відсутність перевищення нормативних концентрацій важких металів, спостерігалось незначне пригнічення росту кореневої системи *Allium cepa* L., що може бути пов'язано із сукупною дією металів та змінами агрохімічних властивостей ґрунту. Отримані результати підтверджують доцільність використання методів біотестування для екологічного моніторингу військових полігонів.

Список використаних джерел

1. Губачов О. І. Особливості використання рослин для біотестування ґрунтів з метою визначення рівня екологічної безпеки промислових територій. Науковий вісник Кременчуцького університету економіки, інформаційних технологій і управління. Нові технології. 2010. № 3(29). С. 164–171.

2. Горон М., Джура Н., Романюк О. та ін. Фітотестування як експрес-метод оцінки токсичності нафтозабруднених ґрунтів. Вісник Львівського університету. Серія біологічна. 2012. Вип. 58. С. 185–192.

3. Тригуб В. І., Домусчи С. В. Біотестування як метод дослідження токсичності ґрунтів. Вісн. Одес. нац. ун-ту. Сер.: Географічні та геологічні науки. 2020. Т. 25. Вип. 2(37). С. 112–127. [https://doi.org/10.18524/2303-9914.2020.2\(37\).216565](https://doi.org/10.18524/2303-9914.2020.2(37).216565).

4. Shaforost Yu., Pogrebnik O., Lut O., Litvin V., Shevchenko O. (2024). Chemical military-technogenic load on the soils of military training grounds. *Plant and Soil Science*, 15(2), 67–79. <https://doi.org/10.31548/plant2.2024.67>

ТЕОРЕТИЧНЕ ОБҐРУНТУВАННЯ АДАПТИВНОГО ПОТЕНЦІАЛУ ТА ПРОДУКТИВНИХ ХАРАКТЕРИСТИК ЯЧМЕНЮ ЯРОГО В УМОВАХ ЦЕНТРАЛЬНОГО ЛІСОСТЕПУ

Жанна Новак, Євгеній Зубко

Уманський національний університет

e-mail: evgenijzubko060@gmail.com

В умовах змін глобальних і регіональних кліматичних трендів оптимізація структурних елементів врожаю зернових культур значною мірою залежить від екологічної пластичності генотипів, обумовленої їхніми генетичними особливостями. Ячмінь ярий (*Hordeum vulgare* L.), зокрема, відіграє важливу роль у структурі сучасного землеробства завдяки своїй високій агрономічній цінності [6]. Однак непередбачувані коливання погодних умов у критичні фази онтогенезу цієї культури створюють значні загрози для стабільного виробництва зерна [2].

Вивчення взаємодії системи «генотип–середовище» є ключовим етапом у розробці кліматично адаптованих технологій вирощування. Сучасні кліматичні виклики вимагають нових підходів у селекції та біотехнологіях, які спрямовані на підвищення стійкості ячменю до абіотичних стресових чинників [5]. Зокрема, для зони Центрального Лісостепу України, до якої належить Уманське плато, основними лімітувальними факторами залишаються дефіцит продуктивної вологи та температурний стрес під час критичних фаз репродуктивного розвитку [4].

Відповідно до моделей кліматичних змін, зростання температур може серйозно впливати на процеси наливу зерна, що у свою чергу відбивається на його якості: вирівняності, масі тисячі зерен та вмісті білка. Це створює ризики для стабільного забезпечення пивоварної якості зерна [3].

Оптимізація адаптивних параметрів сортів ячменю є важливим чинником підвищення його ефективності у несприятливих умовах. Значну роль тут відіграє вибір сортів з високою екологічною пластичністю – інтенсивних (значення $bi > 1,0$) та універсальних, або пластичних ($bi \approx 1,0$), які проявляють стабільний рівень гомеостазу. Дослідження показують, що сорти ячменю ярого для Лісостепу значно різняться за рівнем адаптивності [3, 4].

У стресових умовах пластичні сорти виявляють здатність зберігати стабільну продуктивність завдяки мобілізації внутрішніх ресурсів та ефективнішому використанню вуглеводів, тоді як інтенсивним сортам потрібне оптимальне живлення для компенсації зовнішніх стресів [3].

Центральний Лісостеп України, маючи значний ґрунтовий потенціал, останнім часом зазнає істотних гідротермічних коливань протягом весняно-літнього періоду, що безпосередньо обмежує врожайність ячменю. Згідно з глобальними кліматичними моделями, тепловий стрес і зміни у розподілі опадів істотно впливають на формування якісних і кількісних характеристик зерна [4]. У зв'язку з цим успішність вирощування цієї культури в регіоні значною мірою залежить від здатності окремих сортів активувати захисні й компенсаторні механізми в критичні фази органогенезу [5].

Агротехнічний фактор також залишається вирішальним для забезпечення сталості продуктивності. Результати багаторічного моніторингу, свідчать про те, що регулярне внесення мінеральних добрив (наприклад, еквіваленти $N_{60}P_{60}K_{60}$ на тлі післядії органічного добрива) сприяє підвищенню адаптивної спроможності посівів. Оптимізоване живлення NPK дозволяє досягти щільності продуктивного стеблостою в межах 550–620 рослин на 1 квадратний метр, збільшити масу тисячі зерен до 45–48 грамів та покращити якість білково-вуглеводного комплексу зернівок [1, 3].

Для забезпечення сталого рівня врожайності ячменю ярого в Центральному Лісостепу необхідна інтеграція екологічно стабільних генотипів із раціональною системою мінерального живлення. Моделювання цих процесів допомагає адаптувати агротехнології вирощування до нових кліматичних умов, забезпечуючи стабільний врожай відповідно до генетичного потенціалу культури [1].

Список використаної літератури

1. Господаренко Г. М., Кочубей С. М. Продуктивність ячменю ярого за тривалого застосування добрив у польовій сівозміні. Вісник Уманського національного університету садівництва. 2020. № 1. С. 24–29.
2. Маренич М. М., Юрченко С. О. Теоретичне обґрунтування адаптивних технологій вирощування зернових культур в умовах змін клімату. Вісник Полтавської державної аграрної академії. 2023. № 2. С. 12–19.
3. Полторецький С. П., Вожегова Р. А., Кононенко Л. В. Оцінка адаптивної здатності та стабільності сортів ячменю ярого в умовах змін клімату. Зернові культури. 2019. Т. 3, № 2. С. 245–252.
4. Cammarano D., Ronga G., Di Mola I. Impact of climate change on spring barley yield and quality in Mediterranean-type environments. European Journal of Agronomy. 2021. Vol. 122. Art. 126173.
5. Sallam A., Alqudah A. M., Dawood M. Genetic diversity and molecular breeding for tolerance to abiotic stresses in barley. International Journal of Molecular Sciences. 2023. Vol. 24, No. 3. P. 2110–2132.
6. Tricase C., Amicarelli V., Lamonaca E. Economic and agronomic value of barley (*Hordeum vulgare* L.) in changing agricultural systems. Agronomy. 2019. Vol. 9, No. 7. P. 391–405.

АВТОРСЬКИЙ ПОКАЖЧИК

Анікіна Ніна	41, 42, 44, 45, 47	Копилова Людмила	41, 42, 44, 45, 47
Архіпов Іван	71	Корженівський Олександр	89
Баранова Дар'я	101	Корочкова Таїсія	44
Бенеш Марек	33	Корчик Наталія	74
Беляєв Антон	87, 106	Крамарьов Сергій	117
Бойко Вікторія	64	Кривущенко Ольга	41, 42, 44, 45, 47
Бондарчук Сергій	13, 23, 26	Курмач Михайло	48, 49
Буденкова Надія	74, 97	Курочка Альона	50
Валішкевич Богдана	31	Лай Вейпенг	13
Візір Дмитро	80	Левандовський Ігор	89
Візір Микола	80	Литвин Валентина	84, 98, 104
Візір Руслан	80	Литвин Юлія	115
Войко Анастасія	104	Литюга Олег	48
Габдулін Маратбек	41, 42, 44, 45, 47	Лобанов Віктор	16
Гаврилюк Наталія	41, 42, 44, 45, 47	Лю Іньче	13
Гічан Ольга	78	Люльченко Людмила	94
Дацюк Андрій	16	Ма Їдінг	13
Дехтяр Марина	60	Максимова Наталія	108
Джужа Олег	18	Мандрабура Софія	75
Дорошенко Любов	56	Машира Василь	42
Досталкова Луціє	33	Мельник Андрій	36
Євдокименко Віталій	18	Мисіна Оксана	74, 97
Жабковська Олена	75	Мищенко Євгеній	50
Жанг Жісянг	13	Мінаєв Борис	8, 11, 21, 29
Жирко Юрій	41, 42, 44, 45, 47	Мінаєва Валентина	8, 21
Заболотній Роман	23	Мукомела Соф'я	113
Загребельна Діана	81	Мусієнко Діана	29
Золотаренко Анатолій	41, 42, 44, 45, 47	Нич Яцек	33
Золотаренко Олександр	41, 42, 44, 45, 47	Новак Жанна	122
Зубко Євгеній	92, 122	Новікова Олена	90
Їроушкова Елішка	33	Озеран Тетяна	98
Йю Тао	13	Огрен Ханс	11
Каменських Дмитро	18	Панашенко Вероніка	31
Као Їлін	13	Панченко Олександр	8, 21
Карауш-Кармазін Наталія	33	Пасічник В'ячеслав	71, 87
Качоровська Ольга	36	Петрушина Галина	108, 117
Коваленко Софія	109	Погребняк Олег	92, 113, 115, 118
Козакевич Роман	58	Подсядли Радослав	33
Комкова Анастасія	26	Поляков Сергій	48

Плющ Валентина	64, 67	Федина Лариса	62
Пробін Маркета	84	Федина Михайло	62
Радченко Ольга	36	Філоненко Оксана	16
Решетник Марія	36	Ці Юєїнь	11
Рогальський Сергій	18	Чен Чао	13
Романенко Еліна	48, 49	Шапошнікова Тетяна	41, 42, 44, 45, 47
Савенко Олександр	41, 42, 44, 45, 47	Шафорост Юлія	87, 90, 101, 106 118, 120
Свобода Данієль	33	Швець Ігор	99
Соколова Романа	33	Швець Олексій	48, 49
Старокадомський Дмитро	36	Шевченко Олександр	75, 118
Стахіра Павло	8, 21	Шкурдода Сергій	71
Сяо Лідань	11	Шкута Вероніка	120
Тарадайка Владислав	87, 106	Шинкаренко Дмитро	53
Теребінська Марія	16	Щур Дмитро	41, 42, 44, 45, 47
Тимкович Карина	67	Янь Бін	11
Тимошук Злата	58	Яремов Павло	48
Тимошук Ольга	109	Яшук Людмила	111
Ткачук Ольга	16		

Електронне видання

**II Міжнародна наукова
інтернет-конференція
«Фундаментальні підходи та
інновації в хімії»**

Збірник матеріалів

Підписано у світ 11.06.2026

ФОП Цибульська В.О.

Свідоцтво про внесення суб'єкта видавничої справи до державного
реєстру видавців, виготівників і розповсюджувачів видавничої
продукції

ДК № 6562 від 03.01.2019

ISBN 978-617-8324-82-7



9 786178 324827