



Національна академія наук України

**Інститут хімії функціональних матеріалів
НТК «Інститут монокристалів»**



**XV ВСЕУКРАЇНСЬКА КОНФЕРЕНЦІЯ
МОЛОДИХ ВЧЕНИХ, СТУДЕНТІВ ТА АСПІРАНТІВ
З АКТУАЛЬНИХ ПИТАНЬ ХІМІЇ**

Збірка праць

**Харків
7-10 жовтня 2025 року**

XV Всеукраїнська конференція молодих вчених, студентів та аспірантів з актуальних питань хімії. Збірка праць. — Дніпро: Середняк Т. К., 2025, — 87 с..

ISBN 978-617-8648-52-7

© ІХФМ НТК ІМК НАНУ, 2025

ПАРТНЕРИ

XV Всеукраїнська конференція молодих вчених, студентів та аспірантів з актуальних питань хімії – 2025 проходить за підтримки Enamine Ltd та компанії «Хімлаборреактив».



Конференція відбувається за інформаційної підтримки Харківського хімічного семінару.

<https://www.isc.kh.ua/en/seminar>

Воркшопи організовані в рамках проєкту НФДУ: «Розробка нових матеріалів медико-біологічного та ветеринарного призначення на основі супрамолекулярних систем» (2023.05/0003).

Детальніша інформація про проєкт доступна за посиланням:

<https://www.isc.kh.ua/uk/supra>



Програмний комітет:

- академік НАНУ, д.х.н., проф. Валентин ЧЕБАНОВ

Голова програмного комітету

- д.х.н., проф. Олександр ЦИГАНКОВ

Голова секції органічної, медичної та фармацевтичної хімії

- к.х.н., с.д. Костянтин БЄЛІКОВ

Голова секції фізичної, неорганічної, аналітичної хімії та матеріалознавства

- д.х.н., с.н.с. Олександр КИРИЧЕНКО

- к.х.н., с.д. Катерина БРИЛЬОВА

- к.х.н., с.д. Ірина КОНОВАЛОВА

- к.х.н., с.д. Ольга КОЛОСОВА

Організаційний комітет:

- к.х.н., доц. Олеся КУЛИК

Голова Оргкомітету

- PhD Дар'я МЯСНІКОВА

Заступник голови Оргкомітету

- к.х.н. Вікторія ВАРЧЕНКО

Секретар Оргкомітету

- к.х.н. Зінаїда БУНІНА

- к.х.н., с.д. Олександр ЗБРУЄВ

- PhD Маргарита ЧЕРНЯКОВА

- Володимир СІРОУС

- PhD Ростислав СВОЯКОВ

- Маргарита ПУЖАЙЧЕРЕДА

- Владислав ГОНЧАРОВ

- Олександр СІДЕНКО

ВОРКШОПИ

Dry It Smart!
Основи роботи з лабораторною ліофільною сушаркою

Інструктор: Колосова Ольга Сергіївна¹

¹Інститут хімії функціональних матеріалів, НТК «Інститут монокристалів» НАНУ, пр.
Науки 60, 61072 Харків, Україна
e-mail: olgakolosova936@gmail.com

Мета воркшопу: ознайомлення учасників із принципами роботи лабораторної ліофільної установки *Martin Christ Alpha 3-4 LSCbasic* (Рис. 1), її технічними можливостями та прикладними аспектами використання в наукових дослідженнях. Учасники засвоять базові навички підготовки зразків, налаштування параметрів сушіння та інтерпретації отриманих результатів.

Special system

The condenser temperature of the Alpha 3-4 LSCbasic is -105°C . The ice capacity is 4 kg.

The specialized system is available in two different packet configurations. Meets increased safety requirements for commonly flammable solvents.

Ice condenser capacity
4 kg

Ice condenser temperature
 -105°C

Footprint
780 x 415 x 540 mm



Рис. 1. Установка *Martin Christ Alpha 3-4 LSCbasic* з основними робочими характеристиками. (Фото з сайту виробника)

Стислий опис програми воркшопу:

- Лекція (25 хв):
 - короткий огляд теоретичних основ та технології ліофільного сушіння;
 - огляд технічних характеристик установки *Martin Christ Alpha 3-4 LSCbasic*;
 - основні сфери її застосування в біології, хімії, фармації та матеріалознавстві;
 - можливості та переваги ліофільного сушіння у порівнянні зі звичайними техніками.
- Сесія "питання-відповідь" (15 хв).
- Практична частина (40 хв):
 - демонстрація підготовки зразка, налаштування параметрів циклу ліофілізації;
 - запуск процесу, зчитування параметрів;
 - учасники зможуть безпосередньо взаємодіяти з приладом та поставити уточнюючі питання щодо його роботи;
 - аналіз отриманих результатів.

Очікувані результати навчання:

- розуміння основних етапів та принципів ліофільного сушіння;
- орієнтування в технічних можливостях установки *Martin Christ Alpha 3-4 LSCbasic* та установок інших типів;
- вміння самостійно здійснювати базові налаштування приладу;
- застосування отриманих знань для підготовки та обробки зразків у рамках власних наукових досліджень;
- здатність критично оцінювати результати сушіння та адаптувати параметри процесу відповідно до типу зразків.

Пік ефективності: або як за допомогою кольорів встановити склад речовини

Інструктори: Сараєв Вячеслав Євгенійович¹, Тімоніна Алвард Разміківна¹

¹Інститут хімії функціональних матеріалів, НТК «Інститут монокристалів» НАНУ, пр. Науки 60, 61072 Харків, Україна
e-mail: ssaraiev@gmail.com; timonina@isc.kh.ua

Мета воркшопу: надати загальні навички використання газової (ГХ) та рідинної (ВЕРХ) хроматографії для вирішення задач з встановлення будови, контролю якості або моніторингу хімічних процесів. Учасникам буде запропоновано ознайомлення з загальними принципами та методами хроматографічного аналізу, роботи з приладами, методами підготовки зразків. Отримання та інтерпретація результатів щодо виявлення домішок у складних матрицях.

Стислий опис програми воркшопу:

- Лекція (20 хв):
 - базові принципи ГХ та ВЕРХ, їх відмінності та вибір для застосування;
 - ознайомлення з можливостями хроматографічного аналізу та різноманіттям детекторів;
 - приклади застосування у фармації (визначення діючих речовин, домішок) та в екології (виявлення пестицидів, ПАВ та ін.).
- Сесія "питання-відповідь" (15 хв).
- Практична частина (50 хв):
 - ознайомлення з основними елементами та складовими частинами хроматографів;
 - підготовка зразків для аналізу (таблетки, рослинна сировина, вода та ін.);
 - основні параметри хроматографування, підбір умов, колонок, елюентів (рН, буфер, ін.);
 - аналіз хроматограмм, ідентифікація сполук, розрахунок, кількісне визначення;
 - обговорення результатів, виявлення можливих помилок та шляхів їх усунення.

Очікувані результати навчання:

- ознайомлення і опанування навиків роботи з ГХ і ВЕРХ;
- практичні підходи щодо підготовки різноманітних зразків для виконання аналізу на хроматографі;
- можливість інтерпретувати результати і оцінювати вміст домішок та/або склад загальних зразків;
- розуміння важливості застосування хроматографії у різних сферах для дослідження складу та чистоти сполуки яка потребує контролю.

Ядерний магнітний резонанс: Магнітна музика молекул

Інструктори: Збруєв Олександр Ігорович ¹, Сахно Яна Ігорівна ¹

¹Інститут хімії функціональних матеріалів, НТК «Інститут монокристалів» НАНУ, пр. Науки 60, 61072 Харків, Україна

e-mail: axz@ukr.net; yana.sakhno@googlemail.com

Мета воркшопу: ознайомити учасників з сутністю методу ядерного магнітного резонансу (ЯМР), з його історією, фізичними основами, пояснити будову та принцип роботи ЯМР-спектрометра. На практиці продемонструвати використання спектрометра і приклади аналізу ЯМР-спектрів та інтерпретації їх для визначення структури органічних сполук.

Стислий опис програми воркшопу:

- Лекція (15 хв):
 - історія відкриття явища ЯМР і розвиток методу;
 - фізичні основи ЯМР і аналогія зі звуковими коливаннями і музикою;
 - будова ЯМР-спектрометра;
 - типи ЯМР-досліджень і приклади ЯМР спектрів органічних сполук;
 - використання методу ЯМР у медицині.
- Сесія "питання-відповідь" (15 хв).
- Практична частина (30 хв):
 - будова ЯМР-спектрометра;
 - підготовка розчинів, вимірювання спектрів;
 - обробка і інтерпретація спектрів.

Очікувані результати навчання:

- розуміння сутності методу ЯМР і його призначення;
- ознайомлення з базовими кроками роботи на ЯМР-спектрометрі та його структури;
- здатність аналізувати ЯМР спектри.

ПЛЕНАРНІ ДОПОВІДІ

Steps Towards Complex Matter: Chemistry!

*Jean-Marie LEHN*¹

¹ ISIS, University of Strasbourg Institute for Advanced Study

The evolution of the universe has generated more and more complex forms of matter through self-organization, from particles up to living and thinking matter. Mankind has created science to unravel the ways and means by which matter has become organized up to a thinking organism in particular on our planet earth. Self-organization is the process by which steps towards life and thought have emerged. Animate as well as inanimate matter, living organisms as well as materials, are formed of molecules and of the organized entities resulting from the interaction of molecules with each other. Chemistry provides the bridge and unravels the steps from the molecules of inanimate matter and the highly complex molecular architectures and systems which make up living and thinking organisms. Molecular chemistry has developed very powerful methods for constructing ever more complex molecules from atoms. Supramolecular chemistry seeks to understand and control the formation and behaviour of complex molecular assemblies. The field of chemistry is the universe of all possible structures and transformations of molecular matter, of which those actually realized in nature represent just one world among all the worlds that await to be created. Conceptual considerations on science in general will be presented. Science shapes the future of humanity!

**Функціоналізовані флуоровмісні насичені циклічні сполуки:
перспективний інструмент органічної та медичної хімії**

Григоренко О. О.^{1,2,3}, Мельников К. П.^{1,2}, Ляшук О. С.^{1,3}

¹ Київський національний університет імені Тараса Шевченка,
вул. Володимирська, 60, 01601 Київ

² ТОВ «НВП «Єнамін», вул. Вінстона Черчилля, 78, 02094 Київ

³ НУ «НДІ «Єнамін», вул. Вінстона Черчилля, 67, 02094 Київ
e-mail: gregor@univ.kiev.ua

У доповіді будуть представлені результати комплексної обробки та систематизації даних щодо потенціалу використання насичених флуорованих карбо- та гетероциклічних фрагментів у дизайні лікарських засобів. Особлива увага буде приділена методам введення флуорованих груп у молекули та їх впливу на фізико-хімічні властивості сполук. Буде висвітлено різноманіття підходів до синтезу флуорованих насичених карбо- та гетероциклічних сполук – від класичних методів прямого флуорування до новітніх способів введення флуороалкільних замісників. Зокрема, будуть розглянуті методи синтезу простих карбо- та гетероциклічних будівельних блоків – похідних циклогептану, циклобутану, спіро[2.2]пентану, піролідину піперидину та оксетану з флуоровмісними замісниками. Будуть представлені результати експериментальних досліджень фізико-хімічних параметрів досліджуваних сполук, таких як кислотність/основність (pK_a), ліпофільність ($\text{Log}P$), водорозчинність (S_w) тощо, а також встановлені закономірності впливу положення та природи флуоровмісного угруповання на перелічені властивості.

Також будуть представлені результати досліджень потенціалу флуорованих насичених циклічних похідних як вихідних сполук в органічному синтезі, зокрема в умовах паралельного синтезу. Зокрема, буде розглянуто реакції Левіна та Мініші за участю флуорованих циклоалкіламінів, циклоалканкарбонових кислот та відповідних трифлуороборатів.

Нові каталізатори гідрування органічних сполук на основі наночастинок перехідних металів

Колотілов С.В.^{1,2,3}, Волочнюк Д.М.^{2,3,4}, Рябухін С.В.^{2,3,4}

¹ Інститут фізичної хімії ім. Л.В.Писаржевського НАН України, просп. Науки 31, 03028 Київ;

² ТОВ НВП "Єнамін", вул. Черчилля Вінстона 78, 02094 Київ;

³ Київський національний університет імені Тараса Шевченка, вул. Володимирська 64/13, 01601 Київ

⁴ Інститут органічної хімії НАН України, вул. Академіка Кухаря 5, 02660 Київ;
e-mail: s.v.kolotilov@gmail.com

Каталітичне гідрування ненасичених органічних сполук є одним з найважливіших процесів тонкого і великотонажного органічного синтезу. Як один з прикладів, що ілюструє важливість таких процесів, можна відзначити, що гідрування заміщених ароматичних сполук є найпростішим шляхом до одержання відповідних заміщених насичених аналогів, оскільки введення різних замісників в ароматичні системи – дуже простий і ефективний процес, на відміну від модифікування насичених циклічних молекул.

Як каталізатори гідрування традиційно використовуються матеріали, що містять наноструктуровані платинові метали та нікель (зокрема, нікель Ренея), в багатьох випадках нанесені на пористі носії. Такі каталізатори мають ряд недоліків, пов'язаних, зокрема, з високою вартістю та/або низькою активністю і селективністю. Зокрема, гідрування сполук за зв'язками C-Br, C-I у присутності каталізаторів на основі Pd, як правило, веде до гідродегалогенування, тому одержання галогенвмісних насичених похідних таким шляхом є неможливим. Гідрування тіофенів традиційними методами веде до утворення бутану (або його гомологів) і H₂S. Пошук нових каталізаторів, використання яких дає можливість зберігати певні функціональні групи при гідруванні ненасичених сполук, є актуальною задачею. Також важливе значення має заміна платинових металів в каталізаторах гідрування на дешевші аналоги.

В доповіді представлено ряд підходів до створення ефективних гетерогенних каталізаторів гідрування зі зниженим або нульовим вмістом платинових металів, та окремо виділено системи, використання яких дає можливість проводити гідрування з високою селективністю – досягати перетворення певних функціональних груп у присутності інших чутливих груп, зупиняти процес гідрування на бажаній стадії тощо. Висока продуктивність каталізаторів гідрування може досягатися підбором умов осадження металічних наночастинок, використанням активних компонентів різного складу, вибором носія каталізатора. Заміна металів на сульфідні є шляхом до створення високоселективних каталізаторів.

Показано, що розклад комплексів нульвалентних паладію або нікелю у присутності певного носія – активованого вугілля, поліаніліну, модифікованого поліаніліну та композитів на їх основі – є перспективним шляхом одержання активних каталізаторів гідрування. Іншим підходом є піроліз комплексів кобальту(II) з різними органічними лігандами, що веде до утворення наночастинок кобальту і вуглецьвмісного матеріалу – одержані системи характеризуються високою активністю в каталітичному гідруванні та, що не менше важливо, мають високу стабільність при зберіганні на повітрі. Роль вуглецевого матеріалу остаточно не з'ясована, але одержані дані дають підстави вважати, що він бере важливу участь у підвищенні каталітичної активності наночастинок кобальту.

Окремий клас каталізаторів гідрування – наноструктуровані сульфідні MoS₂ та Re₂S₇. Ці сполуки поступаються системам на основі наночастинок металів своєю активністю, але їх використання дозволяє проводити гідрування гетероциклічних сполук зі збереженням зв'язків C-Br і навіть C-I в мультиграмових масштабах, а також гідрувати тіофени і бензтіофени без розриву сіркувмісного циклу.

**ОРГАНІЧНА, МЕДИЧНА ТА
ФАРМАЦЕВТИЧНА ХІМІЯ**

Деполімеризація відходів поліуретану методом каталітичного гліколізу

Ковальчук А.Р.¹, Іващук О.С.¹, Супрун В.Я.²

¹ Кафедра хімічної інженерії, Національний університет “Львівська політехніка”,
вул. С. Бандери 12, Львів, 79013, Україна

² Мартін-Лютер Університет Галле-Віттенберг,
Університетська площа 11, Галле, 06108 Німеччина,
e-mail: andrii.r.kovalchuk@lpnu.ua

Зростання обсягів відходів поліуретану (PU) становить серйозну екологічну проблему, оскільки цей хімічно та термічно стійкий гетерополімер має високу інертність до аеробного розкладання [1]. Традиційні методи утилізації, зокрема термолізом або захороненням, супроводжуються значними енергетичними витратами та викидами шкідливих речовин. Деполімеризація поліуретанових відходів методом каталітичного гліколізу з використанням низькомолекулярних гліколів дозволяє ефективно перетворювати їх на цінну мономерну та олігомерну вторинну сировину, придатну для подальшого чи повторного використання у виробництві різних PU виробів чи покриттів [1,2].

Каталітичний гліколіз є одним із найефективніших методів деполімеризації твердих поліуретанових відходів, оскільки він дозволяє проводити реакцію за нижчих температур та скорочує тривалість процесу порівняно з некаталітичним гліколізом. Використання каталізаторів підвищує швидкість розщеплення уретанових фрагментів і сприяє утворенню продуктів із більшою молекулярною однорідністю.

Для експериментального дослідження деполімеризації твердого поліуретану за допомогою гліколізу, як середовище було обрано діетиленгліколь (DEG) завдяки його високій реакційній здатності, комерційній доступності та нетоксичності. Температура кипіння DEG (245 °C) забезпечує проведення процесу при атмосферному тиску без надмірного термічного руйнування продуктів. DEG також є добрим розчинником для каталізаторів, що сприяє рівномірному та гомогенному перебігу реакції [2].

Дослідження проводилося на зразках PU, попередньо подрібнених до фракції 2÷5 мм. Масове співвідношення DEG : PU становило 1 : 2,5. Процес гліколізу проводили в реакторі з мішалкою (кількість обертів: 600 об/хв) за температури 220 °C, у присутності ацетату натрію, як гомогенного каталізатора. Час реакції становив 40 хв.

Отримані дані свідчать, що використання натрій ацетату впливає на показники продуктів гліколізу. Спостерігається зниження гідроксильного числа (HON) та динамічної в'язкості (η) порівняно з некаталітичним процесом, що вказує на більш глибоку ступінь деполімеризації. Водночас підвищення амінного числа (AMN) підтверджує про утворення аміних груп, що є позитивним для подальшого використання отриманих продуктів (рециклополів) при синтезі нових поліуретанових виробів.

Табл. Результати аналізу продуктів деполімеризації PU

Конц. кат., %	HON, мг KOH/г	AMN, мг KOH/г	η , мПа·с
0	712	1,6	726
0,2	547	12,6	581
0,4	556	14,0	619
0,6	589	7,8	544

[1] Wieczorek, K.; Bukowski, P.; Stawiński, K.; Ryłko, I. Recycling of Polyurethane Foams via Glycolysis: A Review. *Materials* 2024, 17 (18), 4617.

[2] Ivashchuk, O. S.; Suprun, W. Ya.; Atamanyuk, V. M.; Kurhanskyi, V. S.; Nahurskyi, A. O.; Chyzhovych, R. A. Depolymerization of Rigid Polyurethane Waste by Catalytic Glycolysis with Diethylene Glycol. *South African Journal of Chemical Engineering* 2025, 52, 61–67.

Antioxidant Potential of 6-(5-Mercapto-4-R-4H-1,2,4-triazol-3-yl)-pyrimidine-2,4(1H,3H)-dione Derivatives

Karpenko Yu.V.¹

¹Zaporizhzhia State Medical and Pharmaceutical University,
26 Mariia Prymachenko Blvd., 69035 Zaporizhzhia, Ukraine
e-mail: karpenko.y.v@gmail.com

Oxidative stress is a key driver in the pathogenesis of inflammatory, neurodegenerative, and cardiovascular diseases. The 1,2,4-triazole scaffold is a suitable pharmacophore for designing multifunctional hybrid molecules with polypharmacological activity. Its incorporation into thiopyrimidine structures is expected to enhance interactions with oxidative-stress targets and may serve as a basis for “synthetic matrices” in the search for innovative antioxidants [1]. Uracil–triazole hybrids bearing thiol/thione functionality can operate through several antioxidant mechanisms, which makes 6-(5-mercapto-4-R-4H-1,2,4-triazol-3-yl)-pyrimidine-2,4(1H,3H)-dione derivatives promising multimodal antioxidants.

The target products were successfully synthesized and isolated in pure form, as confirmed by elemental analysis, ¹H/¹³C NMR spectroscopy, and chromatography–mass spectrometry. A general structure of the series is shown in Fig. 1.

Antioxidant activity. A substantial number of compounds (15 derivatives) outperformed the reference—ascorbic acid, a natural antioxidant. The most active compound exhibited IC₅₀ = 4.458 ± 1 μM, i.e., approximately 27-fold greater efficacy than ascorbic acid. Structural features were identified that can guide the creation of low-toxicity antioxidant adjuvants and cytoprotective agents for oxidative–inflammatory models and as stabilizers of lipid matrices or dosage forms.

Molecular docking. Many derivatives showed low binding energies (–8.7866 to –8.9324 kcal/mol) toward EC 1.11.1.5 Cytochrome c peroxidase (PDB: 2X08) and formed interactions with six key amino acids in the active site (LEU, MET, TRP, SER, HIS, ARG), consistent with their high antioxidant activity.

The developed synthetic methodologies are suitable for expanding the library of potential antioxidants. Incorporating the 1,2,4-triazole pharmacophore is expected to enhance activity and potentially reduce toxicity; the docking data support further *in vitro/in vivo* evaluation.

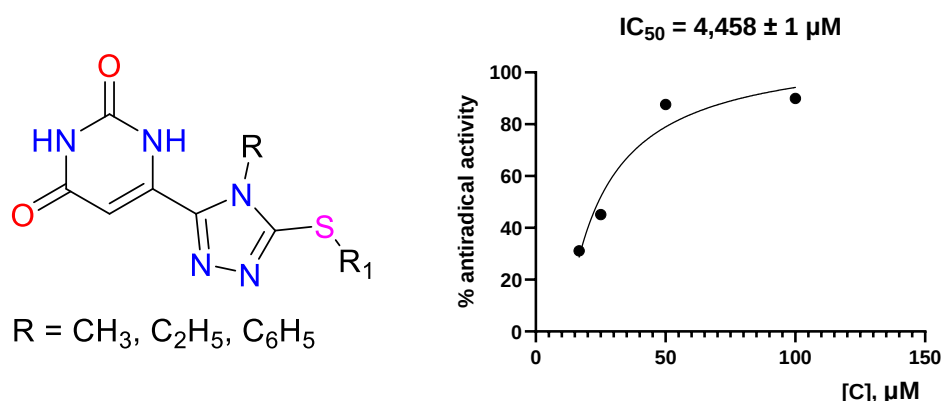


Fig. 1. Investigated compounds and IC₅₀ calculation for the lead compound.

[1] Karpenko, Y.; Medvedeva, K.; Solomennyi, A.; Rudenko, O.; Panasenکو, O.; Parchenko, V.; Vasyuk, S. Design, Synthesis, Molecular Docking, and Antioxidant Properties of a Series of New S-Derivatives of (1,2,4-Triazol-3(2H)-yl)methylthiopyrimidines. *ScienceRise: Pharmaceutical Science* 2025, 62-70.

Мультикомпонентний синтез та модифікація 1,5,6,7-тетрагідро-4H-індол-4-онів, функціоналізованих за пірольним циклом та карбонільною групою

Кравчук О.Ф.¹, Тарасенко Д.О.¹, Котляр В.М.¹, Колос Н.М.¹

¹ Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна, Майдан Свободи, 4, 61022, Харків, Україна

e-mail: oleg.f.kravchuk@gmail.com

Сполуки тетрагідроіндолонowego ряду (4,5,6,7-тетрагідроіндол-4-они) містять відновлене бензольне ядро і виступають міметиками індолу з підвищеним вмістом sp^3 -гібридизованих атомів. Така структурна особливість робить їх цінними об'єктами для медичної хімії, оскільки заміна плоского ароматичного каркасу на насичені фрагменти сприяє кращій розчинності та ефективному зв'язуванню з біомішенями. Використання реакції єнамінонів 1,3-циклогександіонів з арилглюксалами й β -дикарбонільними сполуками в умовах one-pot дозволяє отримати функціоналізовані похідні цього класу. [1].

В роботі наведено результати синтезу та модифікації похідних тетрагідроіндол-4-онів за карбонільною групою з використанням відновлюючих та нуклеофільних реагентів.

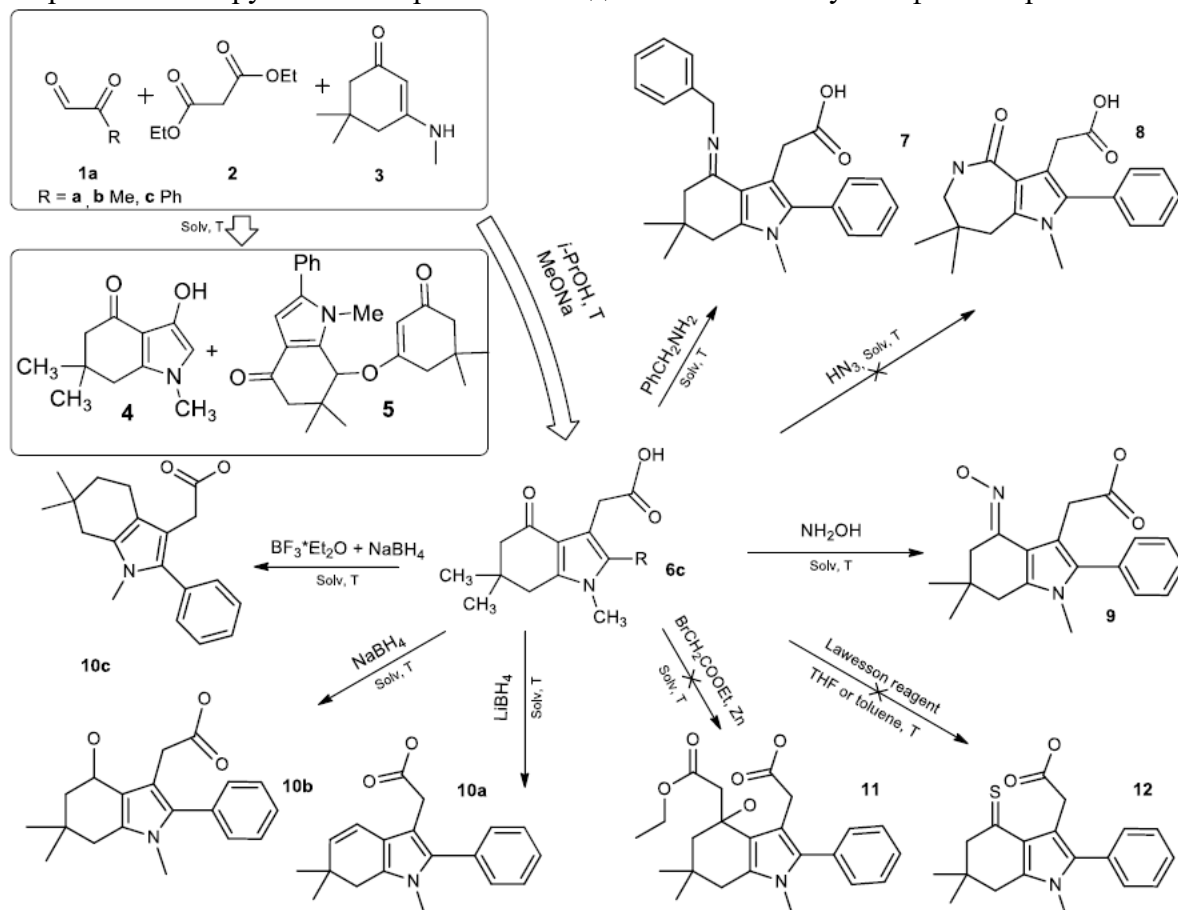


Рис.1. Синтез та подальші модифікація тетрагідро-4Н-індол-4-ону **6с**.

Постадійне введення реагентів: малоновий естер та гліюксаль **1c** обробляли метилатом натрію в *i*-PrOH, а потім додавали енамінон **3** – отримано продукт **6c** з хорошим виходом. Шляхи трансформації сполуки **6c** наведено на схемі, структура модифікованих тетрагідроіндолів встановлена за допомогою ЯМР ¹H, ¹³C та HMRS спектрів.

[1] Bayat, M.; Nasri, S.; Notash, B. Synthesis of new 3-cyanoacetamide pyrrole and 3-acetonitrile pyrrole derivatives. *Tetrahedron* **2017**, *73*, 1522.

Квантово-хімічні аспекти структурування модифікованих полімерних систем арамідного типу з підвищеними міцнісними характеристиками

Водолазська М.В., Токар А.В.

Дніпровський державний аграрно-економічний університет,
вул. Сергія Єфремова, 25, 49009 Дніпро
e-mail: atokar_2004@ukr.net

До перспективних конструкційних матеріалів спеціального призначення на основі ароматичного поліаміду зазвичай відносять фенілон, що за своєю будовою є лінійним гетероланцюговим співполімером та містить у головному ланцюзі місткові амідні групи, відокремлені одна від одної арильними фрагментами. Цей матеріал широко застосовують у виробництві надміцних конструкційних та електроізоляційних пластмас, у тому числі й наповнених термостійкими волокнами. У межах даної роботи за допомогою *ab initio* методів квантової хімії було здійснено порівняльний аналіз вихідного полімеру та його структурно модифікованого різновиду, одержаного шляхом гіпотетичного введення до головного ланцюгу обмеженої кількості полярних, наприклад, уразольних груп, що відповідають складу 4-феніл-1,2,4-триазолін-3,5-діону. За літературними даними [1], високо полярні групи такого типу можуть утворювати одразу два водневі зв'язки замість одного у «класичній», не модифікованій системі, що сприяє помітним змінам, зокрема у реологічних властивостях цих полімерів. Результати розрахунків наведено на рис. 1.

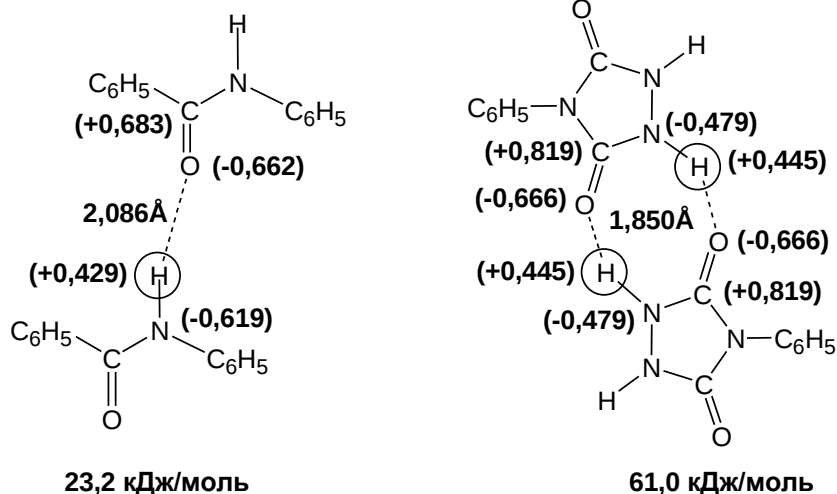


Рис. 1. Модельні комплекси із водневими зв'язками, а також деякі геометричні, енергетичні та зарядові характеристики локалізованих димерних систем

У випадку модельного димеру на основі бензаніліду зазвичай мають справу із типовим водневим зв'язуванням $>C=O \cdots H-N<$, що разом із ефективними *стекінг*-взаємодіями, які виникають між окремими ділянками ароматичних фрагментів молекул, характеризується загальною енергією стабілізації $\sim 23,2$ кДж/моль. Просторове зближення уразольних груп, що відтворює взаємодію хімічно модифікованих ділянок окремих макромолекул, з цієї точки зору є більш вигідним, адже сумарна енергія стабілізації в цьому разі становить не менше $\sim 61,0$ кДж/моль за умов цілковитої відсутності внеску взаємодій бензенових кілець. Одержані результати цілком узгоджуються з даними щодо геометричних та зарядових характеристик цих систем й свідчать, у першу чергу, про більш високу полярність гетероциклічного фрагменту порівняно із містковою амідною групою. Останнє може вказувати на суттєве посилення міцнісних характеристик хімічно модифікованого поліаміду порівняно із його не модифікованим різновидом.

[1] Ana Rita Oliveira de Figueiredo Martins. Effect of intermolecular interactions on the viscoelastic behavior of polyamides. Material chemistry. Université de Lyon, 2019. English. {NNT : 2019LYSE1034}. {tel-02168672}. P. 23–26.

Особливості *post*-перетворень бісамідів Угі на основі похідних коричневого альдегідуВерещак В.О.¹, Фадєєва С.М.^{1,2}, Циганков О.В.^{1,2}, Чебанов В.А.^{1,3}¹ Науково-технологічний комплекс «Інститут монокристалів» НАН України,
пр. Науки, 60, 61072 Харків² НТУ «Харківський політехнічний інститут», вул. Кирпичова, 2, 61000 Харків³ ХНУ імені В. Н. Каразіна, майдан Свободи, 4, 61022 Харківe-mail: vladver02@gmail.com

Пептидоміметики, що містять азидогрупу, є універсальними реагентами для проведення різноманітних внутрішньо- та міжмолекулярних гетероциклізацій. З них можна отримувати макроцикли, гібридні молекули, що пов'язані триазольним фрагментом, а також інші класи азотовмісних гетероциклів, що мають застосування у фармацевтичній хімії та матеріалознавстві. [1]

Продовжуючи дослідження азидомодифікованих бісамідів Угі на основі похідних коричневого альдегіду **1** [2], нашою командою було досліджено ізомеризацію за присутності різних основ, що вела до утворення продуктів типу **2** (рис. 1).

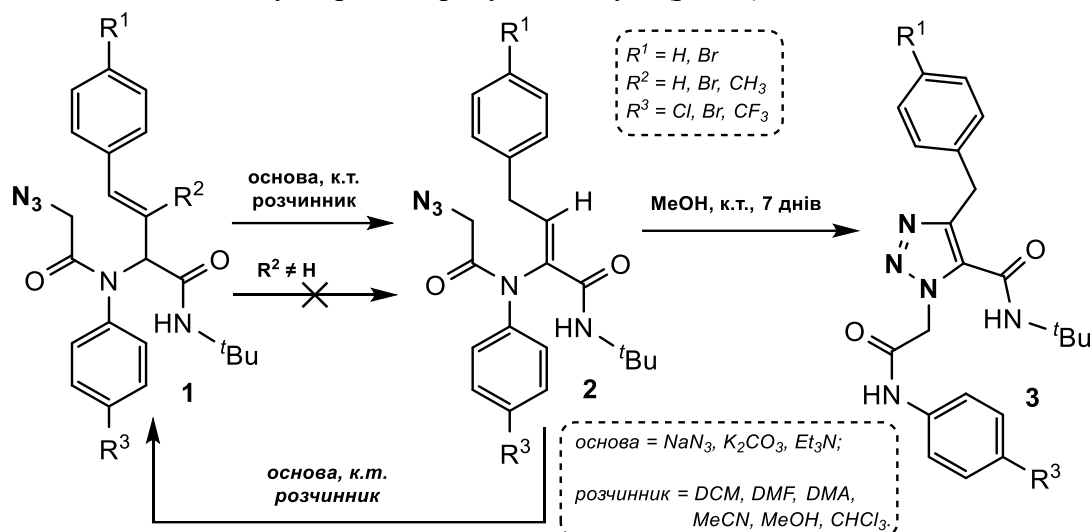


Рис. 1. Схема ізомеризації бісамідів Угі за участі азидогрупи та вінільного фрагменту

Процес відбувався самочинно в умовах азидування хлорпохідних бісамідів Угі [2], а також контролювано із використанням попередньо синтезованих азидобісамідів **1**. Важливою особливістю є те, що структурні ізомери типу **2** були отримані нами за зазначених умов лише із бісамідів Угі із незаміщеним *альфа*-положенням у залишку альдегіду ($R^2 = H$). За присутності основ завжди утворювалась суміш ізомерів **1** та **2**, а їх розділення стало можливо за рахунок суттєво відмінної розчинності у простих етерах. Внаслідок ізомеризації у молекулах зникає хіральний центр при третинному атому карбону, а також змінюється положення $C=C$ зв'язку, що суттєво відрізняє сполуки типу **1** та **2** за 1H ЯМР спектрами.

Введення ізомерів **2** в аналогічні умови за присутності основ аналогічно вело до утворення суміші продуктів типу **1** та **2** (рис. 1). Тривала ж витримка ізомерів **2** у метанолі за кімнатної температури вела до утворення третього типу ізомерів **3**, що, ймовірно, є продуктом азид-алкенового циклоприєднання з подальшим розривом $C-N$ зв'язку (рис. 1).

Будову та чистоту усіх сполук встановлено методами 1H , ^{13}C та LC-MS (ESI), HPLC (UV), а також методом РСД (для кожного типу ізомеру).

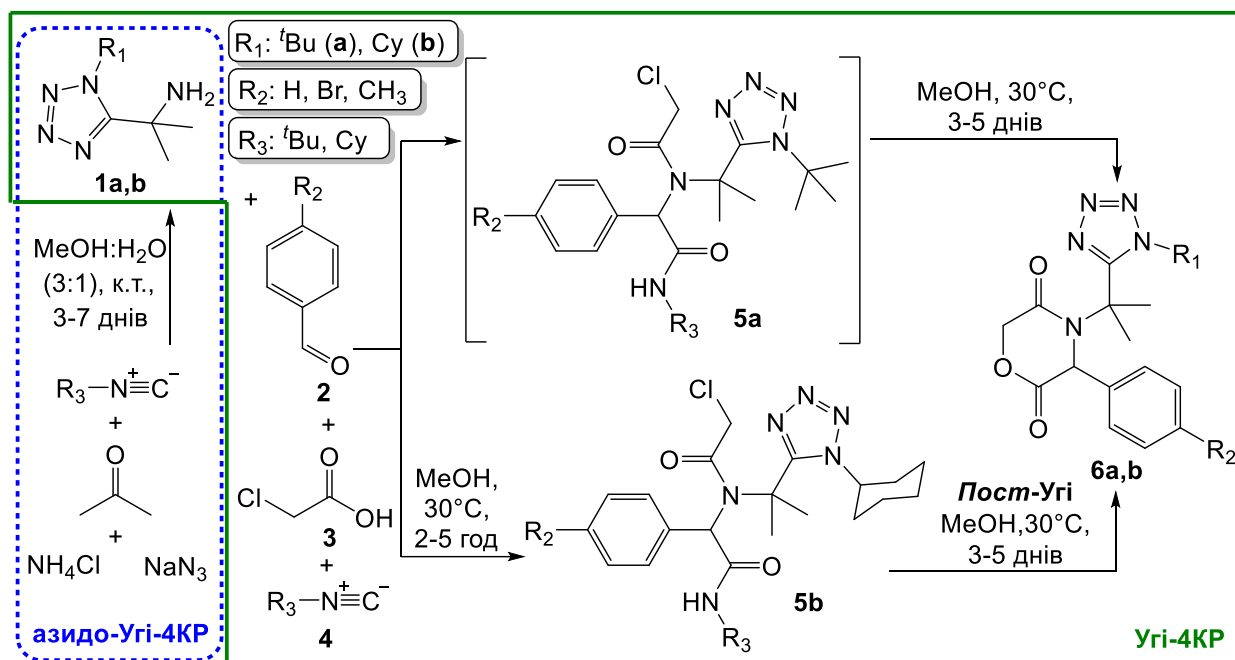
[1] Niu TF, Cai C., Yi L. *Helv. Chim. Acta* 2012, 95, pp 87-99.

[2] Верещак В. та ін. Синтез Бісамідів Угі за участі α,β -ненасичених альдегідів та їх модифікація шляхом мікрохвильового азидування. *Збірник наукових праць, XX наукова конференція "Львівські хімічні читання – 2025" (ЛХЧ 2025)*, Львів, Україна; У34.

Тандем реакцій азидо-Угі та Угі як інструмент до синтезу морфолін-2,5-діонів

Савлук Т.О.^{1,2}, Циганков О.В.^{1,2}, Чебанов В.А.^{1,3}¹ Інститут хімії функціональних матеріалів, НТК «Інститут монокристалів» НАН України, пр. Науки, 60, 61072 Харків² НТУ «Харківський політехнічний інститут», вул. Кирпичова, 2, 61000 Харків³ ХНУ імені В. Н. Каразіна, майдан Свободи, 4, 61022 Харківe-mail: tanyasvkl0@gmail.com

Послідовне поєднання чотирикомпонентної реакції азидо-Угі з іншими ізоціанідними багатокомпонентними реакціями є перспективним [1] оскільки воно веде до утворення довголанцюгових пептидоміметиків. За допомогою відомої методики [2], за реакцією азидо-Угі-4КР, нами було синтезовано амінні компоненти **1a,b** для подальшого введення у реакцію Угі-4КР (рис. 1).

Рисунок 1. Схема синтезу морфолін-2,5-діонів **6a,b**

Під час використання α -амінометилтетразолу **1a** в Угі-4КР замість класичних бісамідів Угі **5a** було виділено неочікувані похідні морфолін-2,5-діонів **6a**. Варто зазначити, що методом LC-MS під час реакції були виявлені лише сліди відповідних бісамідів **5a**. [3]

Заміна амінної компоненти в реакції Угі-4КР на **1b** дозволила виділити і ідентифікувати бісаміди **5b**. В ході подальших досліджень на даних об'єктах **5b** було проведено реакції *пост*-Угі, які приводять до утворення морфолін-2,5-діонів **6b**.

[1] W. Zhang, S. Zhi, X. Ma, Org. Biomol. Chem. 2019, 17, pp 7632–7650.

[2] P. Patil, M. de Haan, K. Kurpiewska et al. Library-to-Library Synthesis of Highly Substituted α -Aminomethyl Tetrazoles via Ugi Reaction. ACS Comb. Sci. 2016, 18 (3), pp 170–175.

[3] A. Tsygankov, T. Savluk et al. Synthesis of Morpholine-2,5-Diones by Tandem of Azido-Ugi and Ugi Reactions. EurJOC. 2025, [doi: 10.1002/ejoc.202500414](https://doi.org/10.1002/ejoc.202500414).

Гідрування заміщеного імідазо[1,5-а]піридину як метод контролю якості гетерогенних каталізаторів гідрування органічних сполук

Іваниця М.О.^{1,2,3}, Пузанов Б. О.^{1,3}, Литвиненко А. С.², Сотнік С. О.^{1,2}, Бур'янов В. В.^{1,3}, Мазур Д. О.², Рябухін С. В.^{1,3}, Волочнюк Д. М.^{1,3,4}, Колотілов С. В.^{1,2}

¹ Enamine Ltd, вул. Вінстона Черчилля 78, 02094 Київ, Україна,

² Інститут фізичної хімії ім. Л.В. Писаржевського НАНУ, Україна, Київ, просп. Науки 31,

³ Київський національний університет імені Тараса Шевченка, вул. Володимирська 60, 01033 Київ, Україна,

⁴ Інститут органічної хімії НАН України, вул. Академіка Кухаря, 5, 02094 Київ, Україна
e-mail: ivanytsya.mykyta@gmail.com

Паладій на активованому вугіллі (Pd/C) широко використовується як каталізатор у гетерогенному гідруванні ненасичених сполук. Однак відсутність уніфікованої методології їхнього приготування зумовлює істотні варіації каталітичних властивостей між зразками різних виробників та навіть між партіями одного постачальника, що ускладнює відтворюваність хімічних перетворень. У зв'язку з цим актуальним є впровадження надійних та доступних методів контролю якості (QC) Pd/C.

Для подолання цієї проблеми запропоновано простий і швидкий метод контролю якості Pd/C, який не вимагає спеціалізованого обладнання. Підхід ґрунтується на модельній реакції гідрування заміщених імідазо[1,5-а]піридинів у метанолі при 40 °C і 1 атм H₂. У реакції утворюються лише три продукти (Рис. 1) з відмінними аналітичними сигналами у спектрах ¹H, ¹⁹F ЯМР та УФ-спектроскопії. Аналіз реакційних сумішей у різні моменти часу дозволяє побудувати своєрідний «відбиток пальця» каталізатора.

Запропонований метод було апробовано на 15 комерційних зразках Pd/C, каталітична активність яких варіювалася від повної відсутності перетворення до кількісного відновлення субстрату до кінцевого продукту гідрування протягом однієї години. Поєднання доступності експериментальної процедури, можливість використання різних спектроскопічних методів та короткого часу аналізу визначає універсальність цього методу для оцінювання якості каталізаторів гетерогенного гідрування органічних сполук.

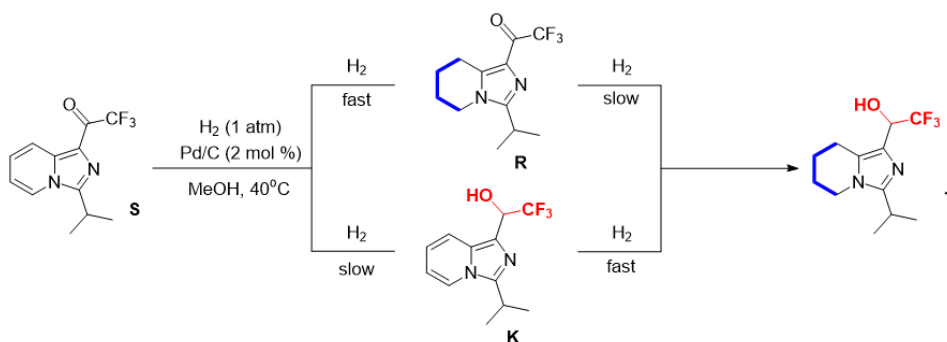


Рис. 1. Схема реакції гідрування заміщеного імідазо[1,5-а]піридину

Мультиграмовий синтез та дослідження фізико-хімічних параметрів похідних азаспіро[2.n]alkanів

Галавський С.^{1,2}, Клименко Д.С.^{3,4}, Черних А.В.^{1,2}, Ляшук О.С.^{3,5}, Маханькова В.Г.^{3,4}, Волочнюк Д.М.^{1,2,3}, Рябухін С.В.^{1,3,4}, Григоренко О.О.^{1,3,5}

¹Enamine Ltd, 02094, Київ, вул. Вінстона Черчіля 67;

²Інститут органічної хімії НАН України, 02094, Київ, вул. Академіка Кухаря 5;

³Enamine SRI, 02094, Київ, вул. Вінстона Черчіля 67;

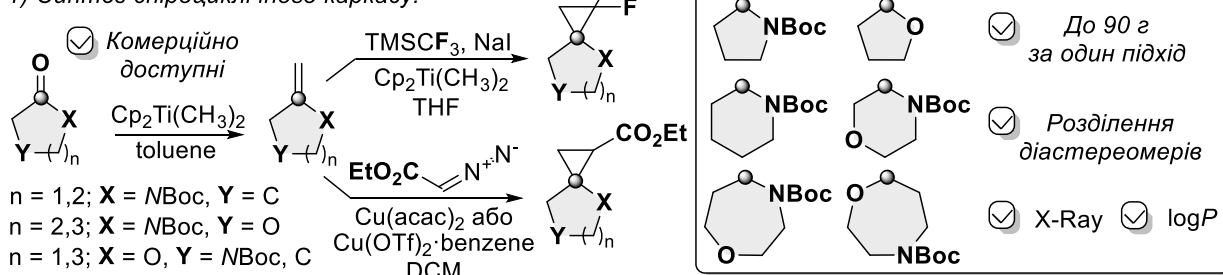
⁴Навчально-науковий інститут високих технологій, Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 03022, Київ, вул. Глушкова 4Г;

⁵Хімічний факультет, Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 01601, Київ, вул. Володимирська 60;

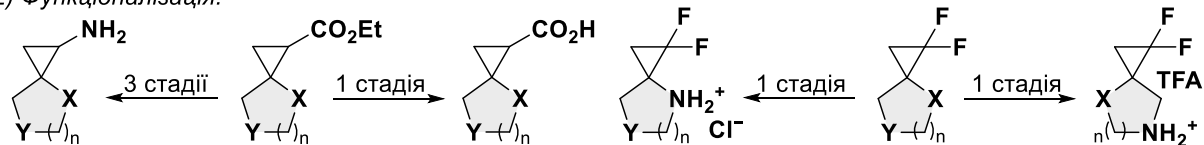
e-mail: klymenkodaria0@gmail.com

Серед сучасних стратегій оптимізації властивостей біологічно активних сполук особливу увагу приділяють введенню конформаційних обмежень та використанню спеціалізованих замісників, зокрема флуоровмісних. Раніше було описано синтез 4-азаспіро[2.3]гексану,^[1] у даній роботі представлено розширену серію аналогічних (окса)азаспіро[2.n]алканових (n = 4-6) будівельних блоків, синтезованих із комерційно доступних N-Вос-захищених лактонів та лактамів. Побудову спіроциклопропанового скелету було реалізовано за допомогою олефінування за Петасисом та подальшого циклопропанування; подальші перетворення функціональних груп дозволили отримати ряд похідних, включаючи N-Вос-захищені амінокислоти, аміни та їх *gem*-дифлуоровані аналоги. Значення LogP було визначено експериментально та порівняно із останніми для найближчих аналогів задля оцінки впливу типу спіроциклічного каркасу та дифлуорування на ліпофільність. Структури отриманих сполук було підтверджено рентгеноструктурними дослідженнями і охарактеризовано за допомогою аналізу графіків вихідних векторів (EVP).

1) Синтез спіроциклічного каркасу:



2) Функціоналізація:

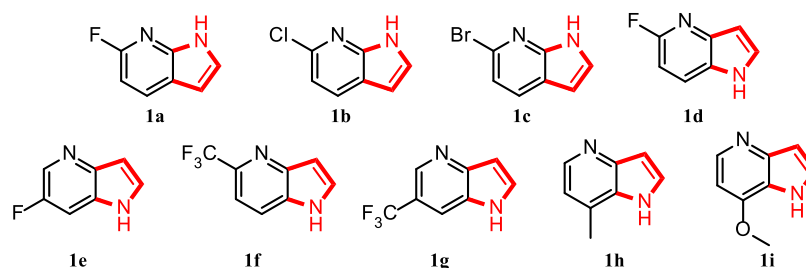


- [1] S. Galavskyy, A. Chernykh, O. Liashuk, D. Lesyk, S. V Shishkina, D. Kliukovskyi, D. M. Volochnyuk, S. V Ryabukhin, O. O. Grygorenko, *J. Org. Chem.* **2024**, 89, 18477–18486.

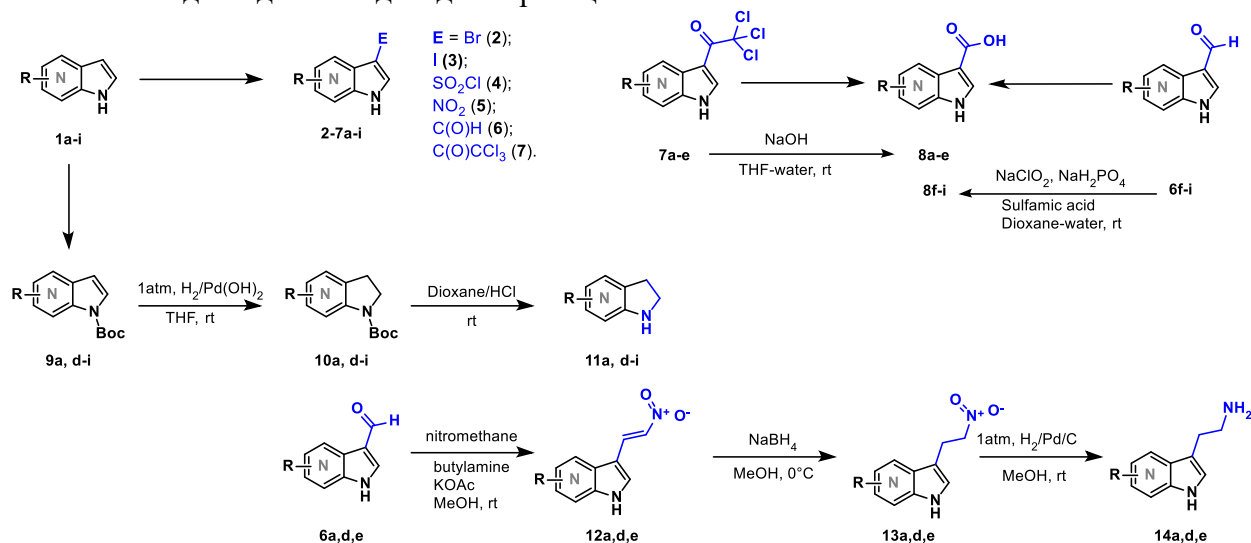
Дослідження реакційної здатності 4-та 7-азаіндолів

Кордубайло М.В.^{1,2}, Борисов О.В.^{1,2}, Зоткін О.О.²¹ Інститут органічної хімії НАН України, вул. Академіка Кухаря 5, Київ 02660. Україна² ТОВ ЕНАМІН, вул. Вінстона Черчіля 78., Київ 01103, Україна.

У наших попередніх роботах була оптимізована методика отримання азаіндолів (**1a-i**) шляхом реакції відповідних орто-галогенанілінів із подальшою гетероциклізацією при каталітичній дії трет-бутилатом калію чи CuI-DMF.



З метою отримання нових багатофункціональних будівельних-блоків для потреб медичної хімії, було проведення дослідження їхньої реакційної здатності. Спочатку було досліджено загальні реакції електрофільного заміщення: 1) Бромовання та йодування з NBS і NIS відповідно призвели до утворення **2-3a-i** з високими виходами. 2) Нітрування в системі нітрат калію – сірчана кислота, були отримані нітропохідні **5a-g**. 3) Реакція з хлорсульфокислотою починалася при 100°C і давала відповідні сульфохлориди **4a-g**. 4) Формілювання за умовами реакції Вільсмейера-Хаака проходило тільки у випадках **1a** та **1d** з виходами близько 85-90% проте в інших випадках спостерігався лише вихідний азаіндол, для формілювання цих сполук використовували систему уротропін-оцтова кислота (формілювання за Даффом), що, нарешті, дозволило отримати сполуки (**6b-c, e-i**), хоча виходи реакції були значно меншими. 5) Ацилювання з хлорангідридом трихлороцтової кислоти було реалізовано для (**7a-e**) та через подальшу галоформну реакцію були отримані відповідні карбонові кислоти (**8a-e**). Решта азаіндолів виявили не достатню реакційну здатність для такого ацилювання, тому кислоти (**8f-i**) були отримані шляхом окиснення відповідних альдегідів за реакцією Пінніка.



Відновлення похідних (**1a, 1d-1h**) проводилось у тетрагідрофурані з Вос-захистом та з використанням гідроксиду паладію (на вугіллі) у якості каталізатора. Також, використовуючи раніше отримані альдегіди було використано для отримання похідних азатриптамінів (**14a, 14d-e**).

**Комплексоутворення кукурбіт[7]урилу з дигідроазолопіримідином:
хроматографічний та термогравіметричний аналіз**

*Мяснікова Д.Ю.¹, Сараєв В.Є.¹, Швець О. Г.^{1,2}, Черняєва О.І.¹, Сахно Я. І.¹, Ващенко О.В.³,
Чебанов В.А.^{1,2}*

¹ Інститут хімії функціональних матеріалів, НТК «Інститут монокристалів» НАНУ,
пр. Науки 60, 61072 Харків

² Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна,
майдан Свободи 4, 61022 Харків

³ Інститут сцинтиляційних матеріалів, НТК «Інститут монокристалів» НАНУ,
пр. Науки 60, 61072 Харків

e-mail: dasha.myasnikova.2012@gmail.com

Дигідропіримідини є важливими фармакологічними компонентами, які входять до складу низки протиракових та противірусних лікарських засобів, з огляду на що їх нові похідні активно синтезують і досліджують [1]. У роботі ми вивчали похідну, описану раніше нашими колегами – етил-5,7-диметил-4,7-дигідротетразоло[1,5-*a*]піримідин-6-карбоксилат (DHP), яка показала антиоксидантну активність, що робить її цікавою для подальших біологічних досліджень [2]. Одним з основних обмежень використання дигідропіримідинів в медичній галузі є їх низька розчинність у воді, яку можна значно покращити шляхом зв'язування з водорозчинними супрамолекулярними рецепторами, наприклад кукурбіт[7]урилом (CB7).

У роботі розроблено методику аналізу DHP методом вискоєфективної рідинної хроматографії (ВЕРХ) для подальшого вивчення комплексоутворення DHP з CB7. За результатами солюбілізаційних досліджень отримано криву типу A_L , що вказує на розчинність комплексу у воді і, відповідно, покращення розчинності DHP при зв'язуванні з CB7 (Рис.1). Для системи CB7:DHP визначено константу стійкості ($K_{1:1}$) та ефективність комплексоутворення (CE). Встановлено, що оптимальними умовами одержання комплексу є кип'ятіння у розчині $H_2O/HCOOH$ (50:50 об.%) впродовж 6 годин, комплексоутворення підтверджено термогравіметричним аналізом.

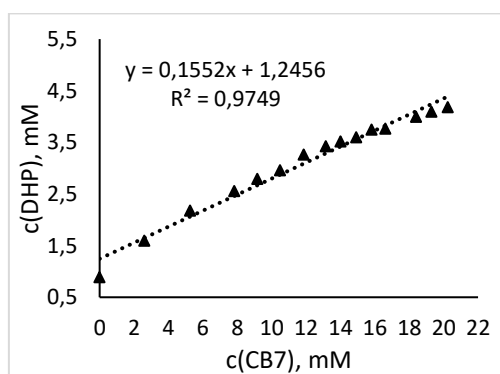


Рис. 1. Фазова діаграма розчинності для системи CB7:DHP

[1] Scapin E.; Frizzo C.P.; Rodrigues L.V.; Zimmer G.C.; Vaucher R.A.; Sagrillo M.R.; Giongo J.L.; Afonso C.A.M.; Rijo P.; Zanatta N.; Bonacorso H.G.; Martins M.A.P. Synthesis, antimicrobial activity and cytotoxic investigation of novel trifluoromethylated tetrazolo[1,5-*a*]pyrimidines. *Med. Chem. Res.* 2017, 26, pp 640-649.

[2] Tkachenko I.G.; Komykhov S.A.; Musatov V.I.; Shishkina S.V.; Dyakonenko V.V.; Shvets V.N.; Diachkov M. V.; Chebanov V.A.; Desenko S.M. In water multicomponent synthesis of low-molecular-mass 4,7-dihydrotetrazolo[1,5-*a*]pyrimidines. *Beilstein J. Org. Chem.* 2019, 15, pp152390–2397.

Робота була виконана в рамках проєкту НФДУ № 2023.05/0003

Вплив *гем*-дифлюорування на значення pK_a функціоналізованих біциклоалканів

Мороз Б.Л.,^{1,2} Ляшук О.С.,^{3,4} Мельников К.П.,^{2,3}
 Головач С.М.,^{1,2} Філатов А.А.,^{1,2} Григоренко О.О.^{2,3,4}

¹ Інститут органічної хімії НАН України, вул. Академіка Кухаря, 5, Київ, 02094, Україна;
 e-mail: probodya50@gmail.com

² ТОВ «НВП» Єнамін, вул. Вінстона Черчилля, 67, Київ, 02094, Україна

³ КНУ імені Тараса Шевченка, вул. Володимирська, 60, Київ, 01601, Україна

⁴ НУ НДІ Єнамін, вул. Вінстона Черчилля, 67, Київ, 02094, Україна

Насичені циклічні аміни високо цінуються в медичній хімії через їх фармакокінетичні властивості, конформаційну жорсткість і метаболічну стабільність. Для покращення фізико-хімічних властивостей цих молекул часто вдаються до структурної модифікації таких каркасів. Зазвичай використовуються дві взаємодоповнюючі стратегії: 1) структурне посилення жорсткості шляхом злиття або утворення містків кільця; та 2) введення флуорованих замісників, зокрема гемінальних дифлуорметиленових груп, для тонкого налаштування електронних властивостей та молекулярної поведінки.[1]

Ми дослідили вплив *гем*-дифлюорування на кислотність (pK_a) конденсованих насичених біциклічних амінів.

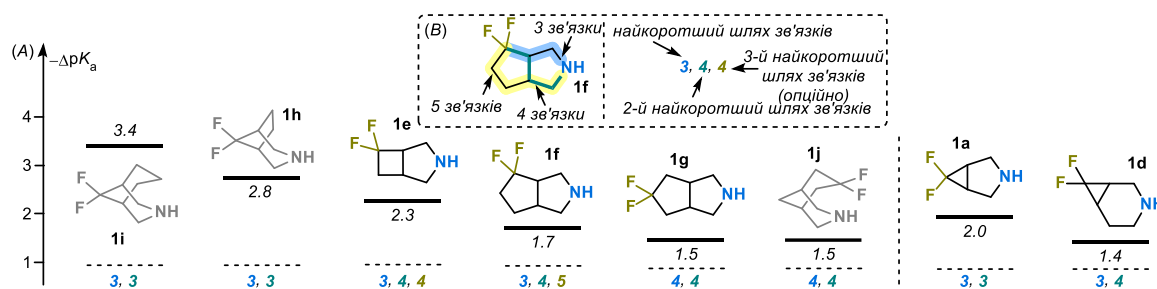


Рисунок 1. (А) Зниження pK_a при *гем*-дифлюоруванні ($-\Delta pK_a$) для протонованих амінів **1a–j**. (В) Визначення найкоротших довжин наскрізного шляху зв'язків між CF_2 та аміногрупою.

Кислотно-основне титрування амінів **1** проводили за раніше встановленими експериментальними протоколами.

Отримані значення кислотності для протонованих *гем*-дифлюорованих амінів коливалися від 6,8 до 9,4 одиниць pK_a . Загалом, спостережуване зниження pK_a корелювало з найкоротшими довжинами наскрізного шляху зв'язку між атомом азоту та фрагментом CF_2 (Рисунок 1. А, В), що вказує на переважний вплив індуктивного ефекту флуору на кислотно-основні властивості сполуки. Дійсно, поступове збільшення найкоротшої або другої найкоротшої відстаней наскрізного зв'язку шляхом введення додаткових CH_2 -ланок призвело до постійного зниження значень $-\Delta pK_a$ (Рисунок 1, А).

Похідні циклопропану **1a** та **1d** не відповідали загальним тенденціям, це може бути пов'язано з добре відомою частково ненасиченою природою циклопропанового кільця, тому резонансні ефекти також можуть сприяти електронній структурі цих біциклічних молекул.[2] Іншими словами, комбінований електронний вплив атомів флуору та циклопропану призвів до нижчих, ніж очікувалося, чистих значень $-\Delta pK_a$. Однак, якщо сполуки **1a** та **1d** розглядати окремо, зниження pK_a також відбувалося за загальною логікою, описаною в попередньому абзаці.

[1] P. Chovatia, A. Sanzone, G.-J. Hofman, R. Dooley, B. Pezzati, I. M. L. Trist, G. Ouvry, in (Eds.: J. Bentley, M.B.T.-P. in M.C. Bingham), Elsevier, 2024, pp. 1–60.

[2] K. L. Williamson, S. Mosser, D. E. Stedman, J. Am. Chem. Soc. 1971, 93, 7208–7213.

Parallel Synthesis of Acylsulfonamides via the Key Azide-Alkyne Cycloaddition

Oleksii V. Gavrylenko,^{1,3} Bohdan V. Vashchenko,^{4,5} Bohdan S. Sosunovych,¹
Volodymyr S. Brovarets,³ Oleksandr O. Grygorenko,^{1,4,5*} Yurii S. Moroz^{1,2,4*}

¹ Enamine Ltd. (www.enamine.net), Winston Churchill Street 78, Kyiv 02094, Ukraine

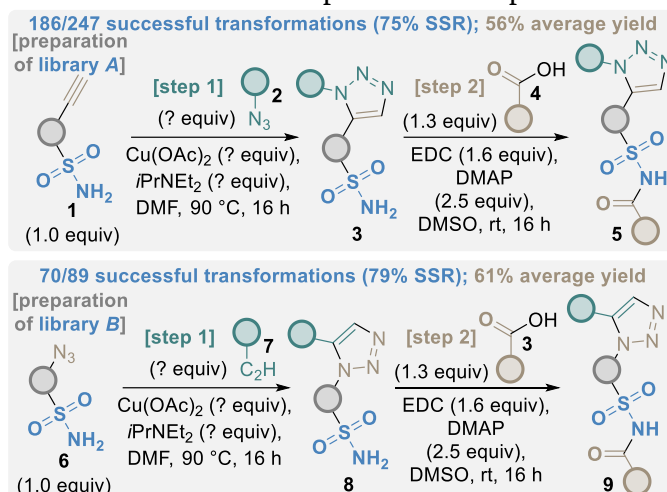
² Chemspace LLC (www.chem-space.com), Winston Churchill Street 85, Kyiv, 02094, Ukraine

³ V. P. Kukhar Institute of Bioorganic Chemistry and Petrochemistry, NAS of Ukraine,
Akademik Kukhar Street 1, Kyiv 02066, Ukraine

⁴ Taras Shevchenko National University of Kyiv, Volodymyrska Street 60, 01601, Kyiv,
Ukraine

⁵ Enamine Scientific Research Institute, Winston Churchill Street 67, Kyiv 02094, Ukraine
e-mail: o.gavrylenko@enamine.net

N-Acylsulfonamides are well-established bioisosteres of carboxylic acids with broad medical relevance,^[1] yet they remain underrepresented in current chemical libraries. To fill this gap, we developed the synthetic platform that combines copper(I)-catalyzed azide-alkyne cycloaddition (CuAAC) with sulfonamide *N*-acylation. This two-step sequence leverages the efficiency of click chemistry and the robustness of acylation to provide rapid access to structurally diverse scaffolds. The parallel workflow minimizes purification steps, increases throughput, and allows for systematic exploration of the chemical space that is important for drug development.



Scheme 1. Synthesis of *N*-acyl sulfonamides *library A*

Using this approach, we intentionally generated two libraries of triazole-acyl sulfonamides from different alkyne or azide (Scheme 1) sulfonamides and carboxylic acid building blocks. Out of millions of possible combinations, 336 members were successfully synthesized, achieving a high success rate of up to 79% and an average yield of isolated products of about 60%. The methodology was shown to be robust across a wide range of substrates, highlighting its practicality and scalability. These results illustrate how the integration of CuAAC with *N*-acylation allows for the efficient generation of compound collections with significant chemical diversity and synthetic utility.

Biological evaluation of the libraries highlighted their pharmacological potential. Screening for human carbonic anhydrase isoforms revealed several low molar mass inhibitors with pronounced selectivity for hCA-IX over hCA-II. Differential scanning fluorimetry and enzymatic assays confirmed the activity profiles. Taken together, these results confirm that *N*-acylsulfonamides are the privileged scaffold, demonstrating that our synthetic strategy not only expands the available chemical space but also provides compounds with clear biological relevance.

[1] K. R. Francisco, C. Varricchio, T. J. Paniak, M. C. Kozłowski, A. Brancale, C. Ballatore, *Eur. J. Med. Chem.* **2021**, 218, 113399.

Метод нейронних мереж в процедурі скринінгу перспективних інгібіторів протеаз M^{pro} та PL^{pro} коронавірусу SARS-CoV-2

*Анохін Д.О., Іванов В.В., Захаров А.Б., Кириченко О.В.,
Коваленко С.М., Калугін О.М.*

Харківський національний університет ім. В.Н. Каразіна, пл. Свободи, 4, 61022, Харків
e-mail: dmitriy25102002@gmail.com

Сучасний стан розробки лікарських сполук взагалі, і анти COVID-19 спрямованості зокрема, привів до поширення інформації щодо результатів докінгу сполук-кандидатів із відповідними ферментами. В зв'язку з цим з'являється можливість систематизації даних і створення на їх основі прогностичних хемоінформаційних моделей. Найбільш пристосованим підходом для цієї мети є метод нейронних мереж (Artificial Neural Network, ANN). В представленій роботі, для дизайну нових інгібіторів протеаз коронавірусу SARS-CoV-2, створено набір комп'ютерних програм на мові Python, орієнтованих на обробку даних докінгу. Побудовано нейронні мережі двох типів (Рис.1 зліва). Регресійна, ANNR, націлена на прямий прогноз спорідненості «білок-ліганд», та бінарна класифікаційна модель, ANNC, яка дозволяє провести відсів неактивних молекул. Будова ANN мережі реалізована в рамках пакетів tensorflow (keras), sklearn, RDKit, та ін. Мережа включає три прихованих шари. Вхідний набір, після попереднього відсіву, утримує до 100 дескрипторів.

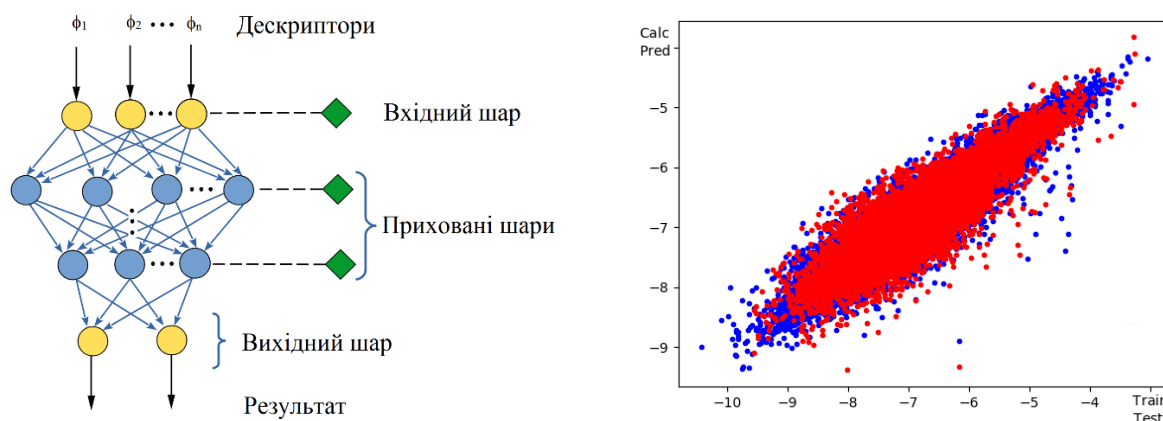


Рис.1 Зліва будова нейронних мереж. Справа – демонстрація ефективності ANNR в моделюванні комплексу з M^{pro} . Блакитні крапки – навчальна вибірка, червоні – тестова.

Для первинного навчання мережі було використано бібліотеку DB_KSM (більше 64000 молекул) із різноманітними гетероциклічними системи та замісниками. Процедура докінгу (AutoDock Vina) та розрахунок дескрипторів (CDK) створюють навчальний та тестовий набори (30% від первинного). Проведене навчання ANNR для комплексу з M^{pro} характеризується коефіцієнтом детермінації для навчаючої вибірки $R_{train}^2 = 0.87$, а для тестової $R_{test}^2 = 0.76$, що свідчить про задовільну прогностичну здатність моделі (Рис.1, справа). В налаштуванні ANNC-мережі активними вважалися системи з спорідненістю > 7 ккал/моль. За результатами навчання ANNC, площа під ROC-кривою (Area Under Curve, AUC) для тренувальної вибірки складає $AUC_{train}=0.95$, а для тестової $AUC_{test}=0.90$, що характеризує прогностичну здатність класифікації молекул-кандидатів як гарну, з невеликими ефектами «перенавчання».

Робота виконувалася за фінансової підтримки Національного фонду досліджень України. Грант № 2021.01/0062 «Молекулярний дизайн, синтез та скринінг нових противірусних фармацевтичних інгредієнтів для терапії інфекційного захворювання COVID-19».

Рентгено-флуоресцентне визначення важких металів у валеріановмісних лікарських засобах

Боднарчук Л.М.¹, Боднарчук О.В.¹

¹ Івано-Франківський національний медичний університет, вул. Галицька, 2, 76000 Івано-Франківськ.

e-mail: Bodnarchuk_Le@ifnmu.edu.ua

Валеріановмісні лікарські засоби займають провідне місце серед седативних фітопрепаратів, залишаючись препаратами першого вибору при лікуванні функціональних розладів нервової системи [1]. Контроль важких металів у рослинних препаратах є критично важливим для забезпечення їх безпеки, оскільки валеріана здатна активно акумулювати токсичні елементи з ґрунту через кореневу систему [2-3].

Рентгено-флуоресцентний аналіз проводився на спектрометрі EXPERT PRO 3 з використанням характеристичних ліній Pb L α (10,55 кеВ), Cd K α (23,17 кеВ), Hg L α (9,99 кеВ) та As K α (10,54 кеВ). Досліджено п'ять валеріановмісних препаратів різних лікарських форм від українських та зарубіжних виробників.

Табл. 1 Вміст важких металів у валеріановмісних препаратах

Препарат	Pb, мг/кг	Cd, мг/кг	Hg, мг/кг	As, мг/кг	Відповідність ДФУ
Настойка валеріани (Україна)	2,34 $\pm$ 0,12	0,43 $\pm$ 0,08	0,08 $\pm$ 0,01	1,12 $\pm$ 0,09	Відповідає
Персен® (Словенія)	1,89 $\pm$ 0,15	0,28 $\pm$ 0,05	0,05 $\pm$ 0,01	0,87 $\pm$ 0,07	Відповідає
Седафітон® (Україна)	3,21 $\pm$ 0,18	0,67 $\pm$ 0,09	0,09 $\pm$ 0,01	1,45 $\pm$ 0,11	Відповідає
Ново-Пасит (Чехія)	1,45 $\pm$ 0,11	0,21 $\pm$ 0,04	0,04 $\pm$ 0,01	0,65 $\pm$ 0,06	Відповідає
Заспокійливий збір №2	4,12 $\pm$ 0,23	0,89 $\pm$ 0,12	0,10 $\pm$ 0,01	1,78 $\pm$ 0,14	Відповідає

Норми ДФУ: Pb $\leq$ 5,0; Cd $\leq$ 1,0; Hg $\leq$ 0,1; As $\leq$ 2,0 мг/кг

Усі досліджувані препарати відповідають вимогам Державної Фармакопеї України щодо граничних концентрацій важких металів. Найнижчий вміст токсичних елементів виявлено у препараті Ново-Пасит (Чехія), що може свідчити про вищі стандарти контролю якості сировини європейських виробників.

Заспокійливий збір №2 демонструє найвищі концентрації всіх досліджуваних металів, що характерно для рослинних зборів через більше різноманіття сировинних компонентів. Вітчизняні препарати показують проміжні значення з дещо вищим вмістом важких металів порівняно із зарубіжними аналогами.

Встановлено кореляційний зв'язок між вмістом свинцю та кадмію ($r = 0,87$), що вказує на спільні джерела контамінації. Відносне стандартне відхилення для всіх визначень не перевищувало 15%, що підтверджує прецизійність розробленої методики.

Рентгено-флуоресцентний метод забезпечує експрес-контроль важких металів у валеріановмісних препаратах з межами детектування: Pb - 0,5 мг/кг, Cd - 0,2 мг/кг, Hg - 0,03 мг/кг, As - 0,4 мг/кг. Всі досліджені препарати відповідають фармакопейним вимогам, проте спостерігається варіабельність вмісту токсичних елементів залежно від виробника та типу лікарської форми. Результати підтверджують необхідність систематичного моніторингу важких металів для забезпечення безпеки валеріановмісних фітопрепаратів.

[1] Vinogradova N., Glukhov A., Chaplygin V. The content of heavy metals in medicinal plants in various environmental conditions: A review. *Horticulturae*. 2023, 9(2), 239.

[2] Ernst E. Toxic heavy metals and undeclared drugs in Asian herbal medicines. *Trends in Pharmacological Sciences*. 2002, 23(3), 136-139.

[3] Saper RB, Kales SN, Paquin J. Heavy metal content of ayurvedic herbal medicine products. *JAMA*. 2004, 292(23), 2868-2873.

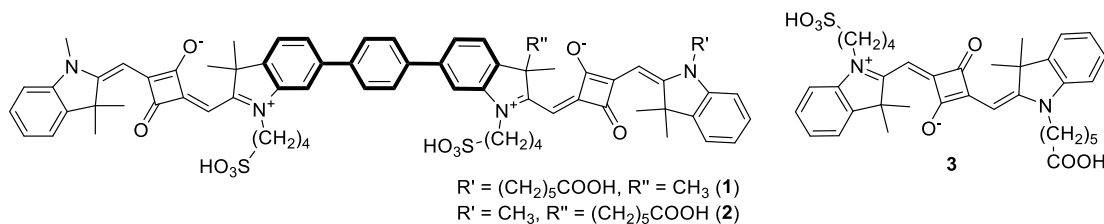
Синтез та спектральні властивості *біс*-сквараїнових барвників з терфенільним ядром

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

Інститут хімії функціональних матеріалів,
НТК «Інститут монокристалів» НАН України, пр. Науки, 60, 61072 Харків
e-mail: xa13121136@student.karazin.ua

Біс-сквараїнові барвники **1**, **2** можуть бути корисні для створення програмованих молекулярних агрегатів на основі ДНК [1].

З використанням стратегії ітеративного крос-сполучення Судзукі-Міяури [2, 3] синтезовано водорозчинні *біс*-сквараїнові ізомерні барвники **1** і **2**, молекули яких містять центральне терфенільне ядро. Структуру напівпродуктів та цільових сполук підтверджено за допомогою ЯМР-спектроскопії та мас-спектрометрії.



Спектральні властивості нових *біс*-барвників **1**, **2** у метанолі, водних розчинах та при кон'югації з ДНК порівняні з характеристиками *моно*-сквараїну **3** (Рис. 1). Малий Стоксів зсув та уширені смуги поглинання барвників **1** та **2** можуть стати перевагами для застосувань у молекулярних фотонних дротах зібраних з ДНК, в схемах для квантової інформатики та для розробки сонячних елементів [1].

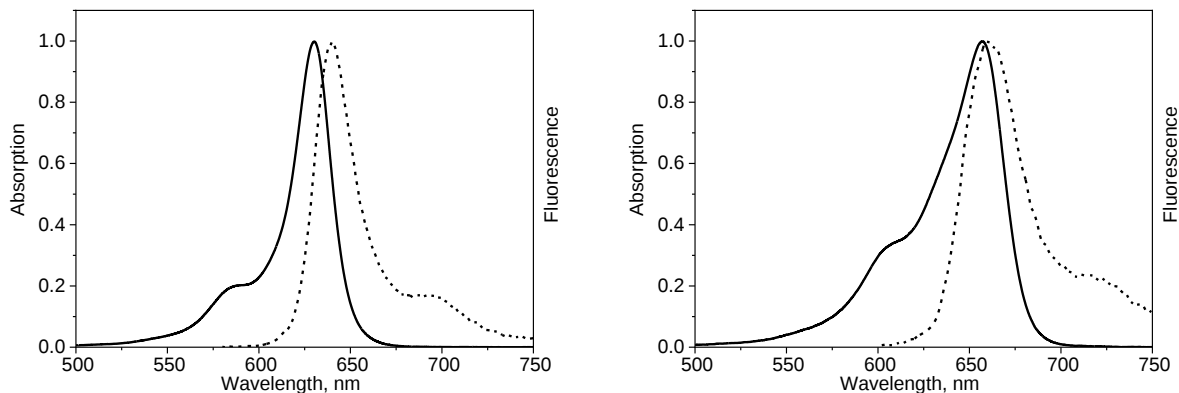


Рис. 1. Спектри поглинання (—) та флуоресценції (.....)
біс-барвника **2** та *моно*-сквараїна **3** у метанолі

[1] Lee, J.; et al. Influence of Collective Excitonic Effects on the Photophysics of Flexibly- and Rigidly-Bridged Squaraine Dimers Targeted for DNA-Based Applications. *ACS Appl. Opt. Mater.* 2025, 3 (7), 1592–1606.

[2] Hiroyoshi, N.; et al. Boron-Masking Strategy for the Selective Synthesis of Oligoarenes via Iterative Suzuki-Miyaura Coupling. *J. Am. Chem. Soc.* 2007, 129 (4), pp 758–759.

[3] Hiroyoshi, N.; et al. Differentially Protected Benzenediboronic Acids: Divalent Cross-Coupling Modules for the Efficient Synthesis of Boron-Substituted Oligoarenes. *Org. Lett.* 2008, 10 (3), pp 377–380.

Розробка методики контролю вмісту кальцію як супутньої домішки у лікарських засобах методом рентгено-флуоресцентного аналізу

Вівсяник В.В.¹, Боднарчук О.В.¹

¹ Івано-Франківський національний медичний університет, вул. Галицька, 2, 76000 Івано-Франківськ.

e-mail: obodnarchuk@ifnmu.edu.ua

Кальцій як елементна домішка займає особливе місце серед контрольованих речовин через його широке використання як допоміжної речовини у виробництві твердих лікарських форм та потенційне надходження з різних джерел [1]. Неконтрольоване надходження кальцію може суттєво впливати на стабільність активних фармацевтичних інгредієнтів, їх біодоступність та терапевтичну ефективність [2].

Рентгено-флуоресцентний аналіз на спектрометрі EXPERT PRO 3 було обрано як основний метод дослідження, що забезпечує неруйнівний експрес-аналіз елементного складу з точністю визначення кальцію до 1 ppm.

Результати визначення вмісту кальцію у п'яти досліджуваних препаратах представлені в табл. 1. Отримані дані демонструють значну варіабельність концентрацій залежно від типу препарату та технологічних особливостей виробництва.

Табл.1 Вміст кальцію у досліджуваних лікарських засобах

Препарат	Вміст Са, %	Похибка, ±	RSD, %
Глюконат кальцію	9,043	0,089	0,98
Аспірин	5,234	0,287	5,48
Парацетамол	2,317	0,571	24,65
Смекта	1,942	0,031	1,60
Ібупрофен	1,342	0,175	13,04

Глюконат кальцію як еталонний зразок показав найвищу концентрацію (9,043%) з найменшою відносною похибкою (0,98%), що підтверджує високу точність розробленої методики. Аспірин виявив найвищий вміст кальцію серед досліджуваних лікарських засобів (5,234%), що обумовлено необхідністю буферизації кислотних властивостей ацетилсаліцилової кислоти.

Валідація методики підтвердила її відповідність міжнародним стандартам ICH Q2(R1): специфічність - відсутність інтерференцій, правильність - похибка $\pm 3\%$, прецизійність - $RSD \leq 8\%$, межа детектування $LOD = 0,8$ ppm, межа кількісного визначення $LOQ = 2,5$ ppm.

Розроблена методика рентгено-флуоресцентного визначення кальцію забезпечує надійний контроль його вмісту в широкому діапазоні концентрацій (1-10%) з прецизійністю $RSD \leq 25\%$ для різних фармацевтичних матриць. Встановлена значна варіабельність вмісту кальцію (1,342-9,043%) підтверджує необхідність індивідуального підходу до нормування для різних категорій препаратів та важливість систематичного контролю цієї домішки для забезпечення якості лікарських засобів.

[1] Xiao, C., Zhu, L., Zhang, X., Gao, R., He, S., Lv, Z., & Hu, C. (2021). Elemental impurities in pediatric calcium carbonate preparations-high throughput quantification and risk assessment. *Frontiers in Chemistry*, 9, 682798.

[2] Guideline, I. H. (2019). Guideline for Elemental Impurities Q3D (R1). *European Medicines Agency: Amsterdam, The Netherlands*.

Рентгеноструктурний аналіз активованого вугілля як ентеросорбенту*Гавриш М.В.¹, Боднарчук О.В.¹*¹ Івано-Франківський національний медичний університет, вул. Галицька, 2, 76000 Івано-Франківськ.*e-mail: Havrysh_Ma@ifnmu.edu.ua*

Активоване вугілля залишається одним з найпоширеніших ентеросорбентів завдяки своїй високій питомій поверхні та ефективності адсорбції токсичних речовин. Метою дослідження було визначення структурних характеристик комерційного препарату активованого вугілля методом рентгенівської дифракції [1-2].

Рентгенодифракційне дослідження проводили на дифрактометрі Shimadzu XRD-7000 в діапазоні кутів $10-70^\circ$ за 2θ . Отримана дифрактограма демонструє характерну для активованого вугілля картину з двома основними дифракційними максимумами, що відповідають частково впорядкованій турбостратній структурі.

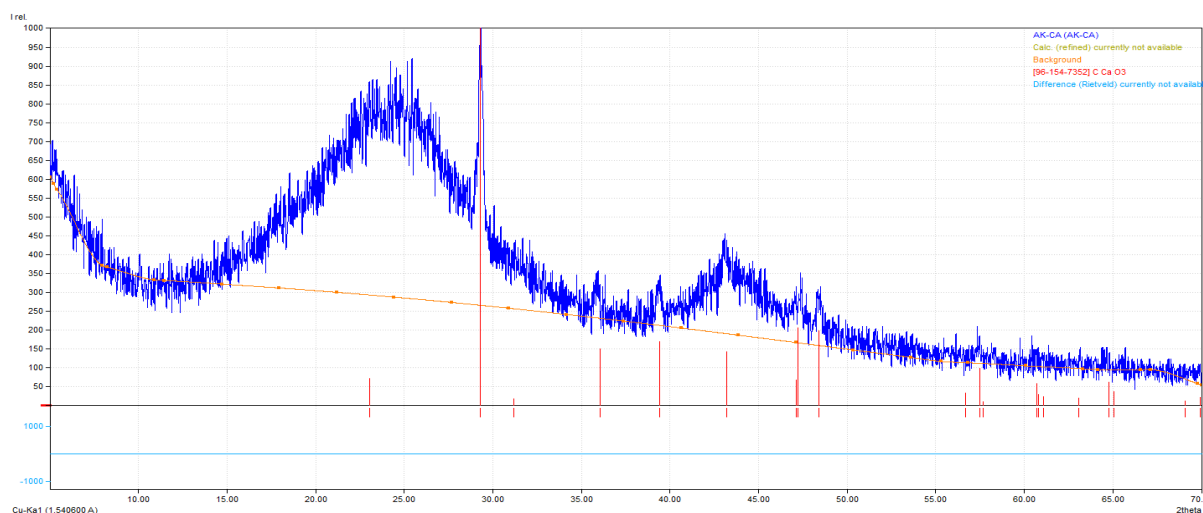


Рис. 1. Рентгенодифракційний спектр активованого вугілля, отриманий за допомогою дифрактометра Shimadzu XRD-7000

Основний дифракційний пік при $2\theta \approx 24-26^\circ$ відповідає (002) рефлексу з міжшаровою відстанню $d_{002} = 3,5-3,6 \text{ \AA}$, що перевищує аналогічний параметр графіту ($3,354 \text{ \AA}$). Збільшення міжшарової відстані свідчить про структурні дефекти та можливу інтеркаляцію молекул між шарами. Застосування рівняння Шеррера дає розмір кристалітів $L_c = 1,0-1,3 \text{ нм}$, що відповідає пакету з 3-4 графенових шарів.

Другий максимум при $2\theta \approx 43-44^\circ$ характеризує латеральну впорядкованість атомів вуглецю з розміром кристалітів $L_a = 2,5-3,0 \text{ нм}$. Інтенсивне дифузне розсіювання в діапазоні $15-35^\circ$ свідчить про значну частку аморфної фази, а ступінь кристалічності матеріалу становить 30-35%.

Додатковий пік при $2\theta \approx 29,4^\circ$ ідентифіковано як основний рефлекс (104) кальциту (CaCO_3), що корелює з високим вмістом кальцію (54,751% у перерахунку на CaO) за результатами рентгенофлуоресцентного аналізу.

Отримані результати підтверджують турбостратну структуру досліджуваного активованого вугілля з малими розмірами кристалітів, що забезпечує високу питому поверхню матеріалу та його адсорбційні властивості.

[1] Li, J.; Qin, Y.; Shen, J.; Chen, Y. Evolution of carbon nanostructures during coal graphitization: Insights from X-ray diffraction and high-resolution transmission electron microscopy. *Energy* 2024, 290, 130316.

[2] Liu, J.; Grohgan, H.; Löbmann, K.; Rades, T.; Hempel, N. J. Co-amorphous drug formulations in numbers: Recent advances in co-amorphous drug formulations with focus on co-formability, molar ratio, preparation methods, physical stability, in vitro and in vivo performance, and new formulation strategies. *Pharmaceutics* 2021, 13 (3), 389.

Каталізовані цеолітами багатокомпонентні реакції α -кетоглутарової кислоти, ароматичних альдегідів та 5-амінотетразолу

Гончаров В.О.¹, Чебанов В.А.^{1,2}, Шишкіна С.В.¹, Сахно Я.І.¹

¹ Інститут хімії функціональних матеріалів, НТК «Інститут монокристалів» НАНУ,
пр. Науки, 60, 61072 Харків

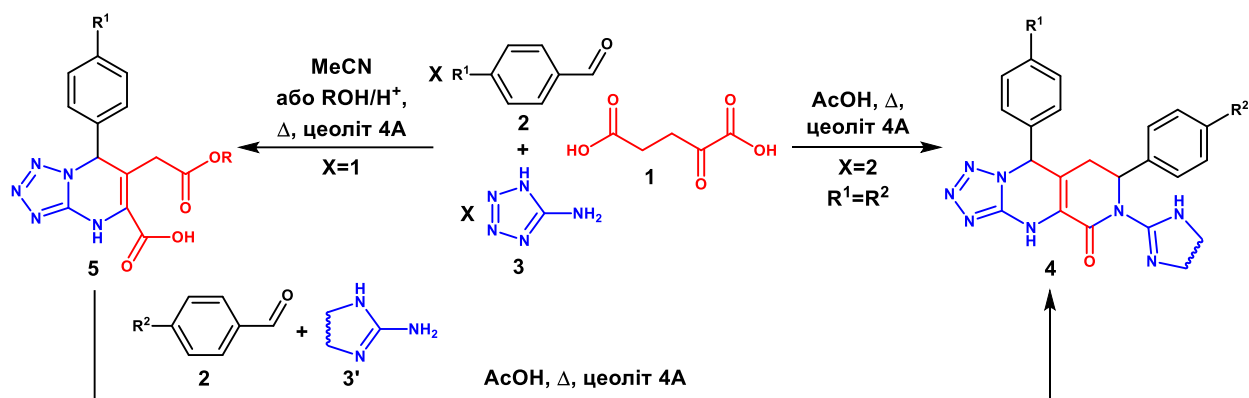
² Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна, майдан Свободи, 4, 61022
Харків

e-mail: goncharov.vl.al@gmail.com

Багатокомпонентні реакції дозволяють за одну синтетичну стадію одержувати структурно-складні багатофункціональні органічні речовини з більшими виходами та зі значно меншими витратами часу, ресурсів, а також меншою кількістю хімічних відходів порівняно з класичними лінійними стратегіями синтезу [1].

Цікавим реагентом для медично-орієнтованого синтезу нових гетероциклічних сполук із застосуванням багатокомпонентних реакцій є α -кетоглутарова кислота (КГК), оскільки за своєю будовою це двохосновна кетокислота, яка також відіграє важливу роль у багатьох біохімічних процесах [2]. Водночас, багатокомпонентні реакції за участю КГК залишаються малодослідженими.

Нами була вивчена багатокомпонентна реакція α -кетоглутарової кислоти **1**, ароматичних альдегідів **2** та 5-амінотетразолу **3**, яка привела до неочікуваних результатів: при кип'ятінні в середовищі оцтової кислоти КГК **1** реагувала з двома еквівалентами альдегіду **2** та аміну **3** з утворенням раніше неописаних продуктів псевдоп'ятикомпонентної реакції – піридопіримідинових похідних **4**.



В середовищі ацетонітрилу або спиртів у присутності соляної кислоти відбувалася трикомпонентна реакція КГК **1** з альдегідами **2** та 5-амінотетразолом **3**, що приводила до утворення дигідропіримідинових кислот **5** або їхніх відповідних естерів. Встановлено, що сполуки **5** в подальшому здатні циклізуватися у сполуки **4** при кип'ятінні в оцтовій кислоті з альдегідами **2** та аміноазолами **3'**.

При цьому варто зазначити, що необхідною умовою протікання даних взаємодій була наявність в реакційному середовищі цеолітів 4А, які можуть відігравати роль не тільки водовіднімаючого засобу, але й каталізатора реакції.

Ідентифікація одержаних сполук здійснювалася на підставі даних мас-спектрометрії, ¹H, ¹³C і двовимірної ЯМР-спектроскопії та рентгеноструктурного аналізу.

[1] Shen, X.; Hong, G.; Wang, L. Recent Advances in Green Multi-Component Reactions for Heterocyclic Compound Construction. *Org. Biomol. Chem.*, 2025, 23 (9), 2059–2078.

[2] Opsommer, L.-T. J. D.; Schalck, T.; Yogiswara, S.; Verstreppe, K. J.; Michiels, J.; Sels, B. F. α -Ketoglutaric Acid as a Promising Platform Chemical for Sustainable Bio-Based Industries. *Chem. Soc. Rev.*, 2025.

Оптимізація ВЕРХ методики визначення амлодипіну в таблетках з використанням «Quality by design»

Горин М.М.¹, Логойда Л.С.¹

¹ Тернопільський національний медичний університет імені І. Я. Горбачевського МОЗ України, вул. майдан Волі, 1, 46001 Тернопіль
e-mail: tverdun_mamy@tdmu.edu.ua

Вступ. Оптимізація існуючих методик та розробка нових підходів до аналітичного контролю є невід'ємною частиною забезпечення ефективності та безпечності лікарських засобів. У світі зростає інтерес до впровадження принципів Quality by design (QbD) у різних фармацевтичних галузях, зокрема й при розробці аналітичних методик.

Метою роботи була оптимізація ВЕРХ методики визначення амлодипіну бесилату (АМЛ) в лікарських засобах з використанням підходів QbD.

Матеріали та методи. Для виконання дослідження використовували рідинний хроматограф Shimadzu LC-2050 C з діодноматричним детектором. Хроматографічні колонки: Luna C8 (150 x 4.6 мм 3 мкм), Luna C18 (100 x 4.6 мм 3 мкм), InertClone ODS (150 x 4.6 мм 3.5 мкм), Zorbax SB C8 (150 x 4.6 мм 3.5 мкм) та Zorbax SB Phenyl (150 x 4.6 мм 3.5 мкм). ФСЗ АМЛ (чистота $\geq 98\%$) закуплено в Sigma-Aldrich Chemicals Co., таблетки амлодипіну бесилату «Амлодипін» 10 мг АТ «Фармак». Метанол (MeOH), ацетонітрил (ACN) та вода ($\geq 99.9\%$ чистоти) отримано від Honeywell, Riedel-de Haen (Німеччина). Фосфорна кислота 88% (для корегування pH) закуплена в Honeywell Fluka. Триетиламін (TEA) придбано в Scharlab S.L. (Spain). Для QbD використано програмне забезпечення MiniTab.

Результати й обговорення. Проведено оптимізацію методики визначення АМЛ в таблетках за допомогою QbD з використанням трирівневого факторного дизайну, враховуючи основні фактори методу (співвідношення MeOH, TEA та значення pH), що впливають на хроматографічний відгук (число теоретичних тарілок (NTP), площа піку (A), час утримування (Rt) та коефіцієнт асиметрії (Tf)). Найбільший вплив на NTP має TEA, тоді як метанол та pH критично не впливають. Із зростанням TEA зростає NTP. На Tf значно впливає pH. Із зростанням значення pH збільшується Tf. Велике значення має вплив TEA, MeOH та їх взаємодії на A. Із зростанням TEA зростає A. Вагомий вплив на Rt має TEA та MeOH. Із зростанням TEA зростає Rt.

Для оптимізації методу використовувались такі критерії: NTP, A, Rt – максимальне значення, Tf – значення від 1.0 до 1.5. Запропоновані хроматографічні умови базувались на ізократичному елююванні АМЛ рухомою фазою в складі: AcN – MeOH - 0.7% TEA з доведенням до pH 2.81 за допомогою 88% фосфорної кислоти у співвідношеннях 30-35-35. Оптимальні умови хроматографування: температура колонки - 30°C, швидкість потоку – 1 мл/хв, довжина хвилі детектування – 237 нм, час утримування - до 3 хв. Оптимізовану методику апробовано на різних хроматографічних колонках. Проведено валідацію аналітичної методики. Діапазон застосування знаходився в межах від 10 до 50 мкг/мл. Інструментами AGREE (0.78) та MOGAPI (79) розраховано, що розроблена ВЕРХ методика є екологічно безпечною.

Висновки. Оптимізована ВЕРХ методика визначення АМЛ в таблетках може застосовуватися для проведення контролю якості готових лікарських форм. В роботі показано сучасні підходи до розробки методики визначення АМЛ в таблетках з використанням QbD та представлено апробацію методики на хроматографічних колонках різної цінової політики. Розроблена методика визначення АМЛ є універсальною, адже при апробації різного типу колонок залишається експресною та задовольняє параметри придатності хроматографічної системи. Одержані результати розширюють можливості використання розробленої методики для лабораторій з невеликим арсеналом хроматографічних колонок.

**Взаємодія гліцерину з циклогексаноном у присутності природних алюмосилікатів
модифікованих сірчаною кислотою**

Давтян А.С.

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

Люстдорфська дорога, 86, 65080 Одеса

e-mail: araksya2103@gmail.com

Зіставлені каталітичні властивості модифікованих сірчаною кислотою природних алюмосилікатів українських родовищ: бентоніту (Н-Bent), кліноптилоліту (Н-CLI) і трепелу (Н-Tr) в реакції гліцерину (GL) з циклогексаноном (CHone). Вивчено вплив масової частки каталізатору ($M_{\text{кат.}}$), температури реакції та мольного співвідношення реагентів на конверсію GL (Z_{GL}) і початкову швидкість його витрати (W_0).

Виявлено, що у присутності Н-Bent, зі збільшенням його $M_{\text{кат.}}$ від 2,5 % мас. до 5 % мас. W_0 практично не змінюється, а з подальшим збільшенням (5-7 % мас.) швидкість зростає майже вдвічі. У присутності Н-CLI швидкість незначно зростає при 2,5-3,5 % мас. та протягом наступних збільшень вмісту каталізатора не змінюється. Що стосується Н-Tr, з кожним збільшенням його вмісту, швидкість збільшується вдвічі. За величинами W_0 при більших $M_{\text{кат.}}$ (5-7 % мас.) зразок Н-Tr виявився більш активним, хоча за величинами Z_{GL} – активний Н-Bent. З кожним збільшенням $M_{\text{кат.}}$ конверсія зростає і досягає 72% у присутності Н-Bent та 39% і 49% у присутності Н-Tr та Н-CLI, відповідно.

Зі збільшенням температури реакції, у присутності Н-Bent швидкість зростає втричі за температури 50-60 °С та в 1,5 рази – за температури 60-70 °С. У присутності Н-CLI і Н-Tr швидкість не змінюється. На відміну від Н-Bent, при 50 °С ці зразки каталізатора взагалі не виявляють активність. У присутності Н-Bent величина Z_{GL} зростає з кожним збільшенням температури реакції і досягає ~50%, а у випадку Н-CLI не змінюється незалежно від температури (15÷16%) і зростає вдвічі у випадку Н-Tr (8÷16%). Більш активним серед досліджених каталізаторів є Н-Bent.

Зі збільшенням мольного співвідношення GL:CHone у присутності трьох каталізаторів W_0 зростають і більшу активність виявляє Н-CLI зі зростанням надлишку CHone. Для Н-Bent і Н-Tr швидкості реакції схожі, а для Н-CLI набагато вищі порівняно з цими зразками. У присутності Н-Tr з кожним збільшенням надлишку CHone величина Z_{GL} зростає майже на 20%: 23% (1:3), 53% (1:6) і 71% (1:8). У випадку Н-CLI і Н-Bent, при співвідношенні 1:3, конверсія складає 31% і 55%, відповідно, а при більших співвідношеннях GL:CHone конверсія не змінюється і досягає >80% для цих зразків.

Слід зазначити, що Н-Tr витримує два цикли роботи, Н-Bent – три цикли, а Н-CLI виявився більш стійким до втрати каталітичної активності і витримує шість циклів роботи.

Особливості реакції GL з CHone у присутності приготовлених каталізаторів досліджували відповідно моделі Міхаеліса-Ментен. Визначено концентраційний порядок реакції по GL виявлено, що у присутності Н-Bent і Н-Tr дорівнює два, а у присутності Н-CLI – три. Визначені константи Міхаеліса (K_M) та максимальні швидкості реакції (W_{max}) у випадку досліджених каталізаторів. Для трьох зразків K_M та W_{max} практично схожі.

Н-Bent має більш високу площу поверхні (243 м²/г), що забезпечує легшу дифузію (доступність) до активних центрів реагентів і продуктів реакції. Це в свою чергу впливає на його каталітичні властивості, тобто чим більша площа поверхні, тим більш активний каталізатор. Але активність каталізаторів змінюється залежно від умов (параметрів) реакції. Тому можна зазначити, що активність досліджених каталізаторів в реакції кеталізації GL в першому наближенні визначається їх кислотністю і загальною площею пор. Тим не менш, внаслідок різного хімічного і фазового складу, кристалічності та неоднорідно-пористої структури, досить складно простежити вплив тих чи інших чинників на каталітичні властивості.

Гемостатичні властивості макропористих кріогелів на основі хітозану та полівінілового спирту

Діхтярук Є.В.¹, Штанова Л.Я.², Гунько В.М.¹

¹ Інститут хімії поверхні ім. О.О. Чуйка НАН України, вул. Олега Мудрака, 17, 03164, Київ

² Інститут хімії високомолекулярних сполук НАН України, Харківське шосе, 48, 02160, Київ

e-mail: eugenchemlab@gmail.com

Значну увагу науковців привертають матеріали медико-біологічного призначення, які застосовуються для створення виробів, пристроїв і препаратів у медицині та біотехнології. Вони використовуються для забезпечення й оптимізації життєдіяльності людини, тварин, рослин і мікроорганізмів [1]. Неконтрольована кровотеча та, як наслідок, геморагічний шок є однією з основних причин летальних випадків при серйозних травмах. У багатьох ситуаціях збереження життя потерпілого залежить від швидкості зупинки кровотечі, особливо якщо поранення локалізоване у ділянках тіла, де неможливе застосування кровоспинного турнікета. Тому створення ефективних гемостатичних засобів є надзвичайно актуальним завданням екстреної медицини [2].

Відомі гемостатичні засоби представлені у вигляді бинтів, серветок, пластрів, що містять кровоспинні речовини синтетичного або натурального походження (амінокапронова кислота, полівініловий спирт, окиснена целюлоза, каолін, желатин, фібриноген тощо). Серед матеріалів медико-біологічного призначення особливе місце займають природні та синтетичні полімери, які значно перевершують інші групи матеріалів за асортиментом і можливостями використання.

Мета роботи — розробити матрицю для аплікаційних кровоспинних засобів на основі кріоструктурованих гідрогелів (кріогелів) хітозану та полівінілового спирту (ПВС), зшитих глутаровим альдегідом (ГА); дослідити їхні гемостатичні властивості на моделі паренхіматозної кровотечі у щурів; оцінити біосумісність одержаної матриці. Вибір компонентів обумовлений їхніми властивостями: хітозан є основним складником комерційного гемостатика Celox™, а глутаровий альдегід відомий як ефективний антибактеріальний засіб.

Кріогелі отримували з водних розчинів хітозану та ПВС методом кріоструктурування за температури -20 °С. Експериментально встановлено, що протягом перших 3 хв кровотечі спостерігалися значні відмінності між показниками крововтрати у контрольній групі ($0,479 \pm 0,043$ г) та при застосуванні тестових зразків: Celox™ — $0,250 \pm 0,022$ г (зменшення на 47,8%, $p < 0.05$); кріогель хітозан-ПВС — $0,168 \pm 0,037$ г (зменшення на 64,9%, $p < 0.001$). Визначено ступені набухання кріогелів у воді та ізотонічному розчині: найвищі значення зафіксовані у зразків із переважним вмістом хітозану.

Таким чином, показано, що макропористі кріогелі хітозан-ПВС, хімічно зшиті ГА, проявляють виражену кровоспинну дію.

[1] Gun'ko, V. M.; Savina, I. N.; Mikhalovsky, S. V. Cryogels: Morphological, Structural and Adsorption Characterization. Adv. Colloid Interface Sci. 2013, 187–188, 1–46.

[2] Xu, G.; Cao, S.; Dong, Y.; Huang, Z.; Chu, C. Strength-Enhanced Expandable Polyvinyl Alcohol/Chitosan Cryogel for Non-Compressible Hemostasis. Int. J. Biol. Macromol. 2025, 285.

Використання солей хаотропних аніонів для розробки ВЕРХ методики одночасного визначення цисплатини та карбоплатини в модельній суміші

Дручок М.І.¹, Логойда Л.С.¹

¹ Тернопільський національний медичний університет імені І. Я. Горбачевського МОЗ України, вул. майдан Волі, 1, 46001 Тернопіль

e-mail: druchok_maiv@tdmu.edu.ua

Вступ. Серед підходів, що використовуються для покращення утримування та розділення у високо-ефективній рідинній хроматографії (ВЕРХ), поширеним вибором є застосування іон-парний реагентів. Однак проблеми, що виникають при їх застосуванні, мотивують науковців досліджувати альтернативні методи для досягнення надійних результатів аналізу, такі як використання солей хаотропних аніонів. Хаотропні агенти покращують утримування та форму піків. Карбоплатин та цисплатин є препаратами платини з протипухлинною дією. Подібність їх за структурою та складністю в аналізі методом обернено-фазової ВЕРХ є основною причиною для обрання препаратів платини як аналіти для нашого дослідження.

Метою роботи була розробка ВЕРХ методики одночасного визначення цисплатину та карбоплатину в модельній суміші з використанням солей хаотропних аніонів.

Матеріали та методи. У роботі використовували рідинний хроматограф Shimadzu LC-2050 C з діодноматричним детектором. Хроматографічна колонка- Luna C18 (100 x 4.6 мм 3 мкм). ФСЗ цисплатину та карбоплатину (чистота $\geq 99\%$) закуплено в Sigma-Aldrich Chemicals Co., лікарські форми «Ебеве» (Австрія). Калію гексафторфосфат (KPF₆), ацетонітрил (ACN), вода ($\geq 99.9\%$ чистоти) отримано від Honeywell, Riedel-de Haen (Німеччина). Фосфорна кислота 88% (для корегування pH) закуплена в Honeywell Fluka.

Результати й обговорення. Теорія посилення взаємодії між аналітом та лігандом C-18 або C-8 колонки припускає, що хаотропи дозволяють отримати кращу експозицію захованих гідрофобних ділянок молекул до їхніх поверхонь, тим самим підсилюючи притягувальні гідрофобні сили між N-вміщуючим аналітом та алкільно-зв'язаною фазою. Отриманий результат цих взаємодій - це збільшені часи утримування, ємності утримування розділювальних молекул. Доведено, що більш інтенсивними є взаємодії, коли у складі рухомої фази використовується ACN, що формує більш товсті багаточастикові структури на стаціонарній фазі, ніж якщо використовується метанол. Іншою важливою характеристикою використання солей хаотропних аніонів у розділенні N-вміщуючих молекул на C18 та C8 колонках є покращення симетрії піків. Враховуючи попередні дослідження та дослід нашої наукової групи, апробовано рухомі фази з використанням буферного розчину 40 мМ KPF₆ (pH 2.4) та ACN у співвідношенні 90:10 та 95:5 і хроматографічної колонки C18 (Luna C18 (100 x 4.6 мм 3 мкм)). Параметри придатності хроматографічної системи задовольняв підхід з використанням рухомої фази – буферний розчин 40 мМ KPF₆ (pH 2.4) та ACN (95:5). Апробували також швидкість потоку рухомої фази, температуру колонки, довжину хвилі детектування. Час утримування цисплатину становив 3.03 хв, карбоплатину – 4.38 хв. Експериментально встановлені оптимальні хроматографічні умови: рухома фаза - буферний розчин 40 мМ KPF₆ (pH 2.4) та ACN (95:5), хроматографічна колонка - Luna C18 (100 x 4.6 мм 3 мкм), температура колонки – 30 °C, швидкість потоку - 0.4 мл/хв, довжина хвилі детектування – 210 нм.

Проведено валідацію аналітичної методики. Діапазон застосування аналітичної методики для обох аналітів - 20 - 100 мкг/мл. Межа виявлення карбоплатину становила 4.12 мкг/мл, цисплатину – 5.18 мкг/мл. Межа кількісного визначення карбоплатину - 12.48 мкг/мл, цисплатину -15.71 мкг/мл. Інструментами AGREE, MoGAPI, complex MoGAPI, AGSA, CaFRI, BAGI та CACI встановлено, що запропоновано ВЕРХ методика є «зеленою».

Висновки. Запропоновано експресну, просту, економічно доступну ВЕРХ методику з використанням хаотропної взаємодії між аналітами та лігандами стаціонарної фази, особливо для слабко утримуючих високо полярних молекул як аналітів, які елюються близько до мертвого об'єму, розділених на обернено-фазових колонках, уникаючи використання іонно-парних агентів. Одержані результати розширюють можливості використання розробленої методики для лабораторій з невеликим арсеналом хроматографічних колонок.

Вплив температури та полярності розчинника на кінетику добування хлоргідринних естерів в реакції бензойної кислоти з епіхлоргідрином

Казаков О.А.¹, Швед О.М.², Бахалова Є.А.³, Діденко Н.О.⁴, Розанцев Г.М.¹

¹Донецький національний університет імені Василя Стуса, 600-річчя., 21, 21021 Вінниця

²Інститут фізико-органічної хімії і вуглехімії ім. Л.М.Литвиненка НАНУ, Харківське ш.,50, 02155 Київ

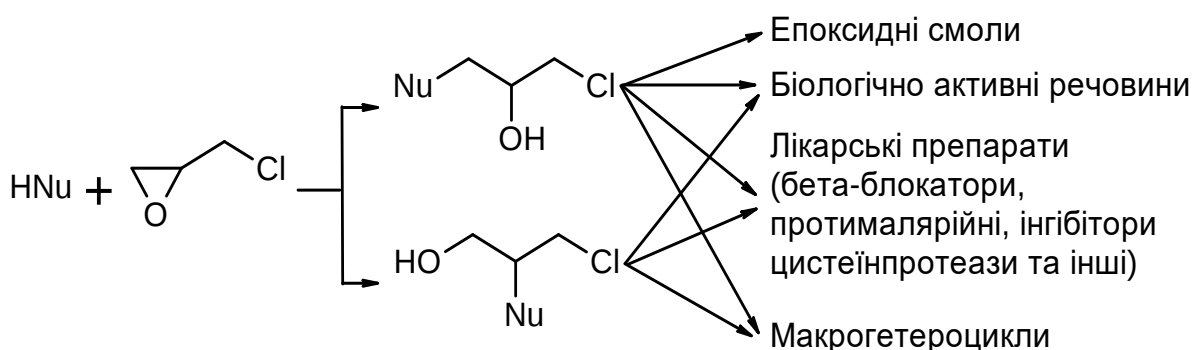
³Приватне акціонерне товариство «Інфузія», Немирівське ш., 84А, 23219 Вінниця

⁴Вінницький медичний університет імені М.І. Пирогова, Пирогова,56, 21018 Вінниця

e-mail: kazakov.o@donnu.edu.ua

Реакція оксиранів з протонодонорами, зокрема карбоновими кислотами, є базовою у синтезі епоксидів, низки лікарських препаратів та біологічно активних сполук, є модельною для дослідження шляхів метаболічної детоксикації речовин екзогенного характеру під дією ферментів епоксигідролаз. Для прогнозування поведінки компонентів та споріднених сполук у реакції нуклеофільного розкриття оксиранового циклу важливими виявляються дослідження закономірностей перебігу реакції, що включають оцінку зміни таких чинників як температура, природа розчинника, структура досліджених речовин на швидкість процесу.

Мета роботи – вивчення сумісного впливу температури і полярності розчинника на реакцію бензойної кислоти з хлорметилоксираном (епіхлоргідрином, ЕХГ) у значному надлишку останнього, що знижує перебіг бічних реакцій, процесів самоасоціації карбонових кислот. Каталізатором обрано сполуку іонної будови – тетрабутиламоній хлорид. Варіювання полярності розчинника суттєво впливає на швидкість реакції у разі процесів, що відбуваються за механізмом S_N2.



Дослідження проведено при варіюванні температури (313÷353 K), концентрації каталізатора (0,00125÷0,005) та полярності розчинника, у якості якого обрано ЕХГ та його суміші з тетрагідрофураном (ТГФ). Хід реакції контролювали за витрачанням бензойної кислоти у часі. Кінетику реакції вивчали до глибоких ступеней конверсії кислотного реагента методом потенціометричного титрування. Експериментальні дані обробляли із застосуванням кінетичних рівнянь та методів статистичної математики. Аналіз кількісних даних проводили методом кореляційного аналізу.

Встановлено нульовий порядок реакції за кислотним реагентом. Варіювання температури, концентрації каталізатора та полярності розчинника дало змогу встановити кінетичні і термодинамічні закономірності цієї реакції, що відповідають S_N2 процесам для заряджених нуклеofilів. Співставлення термодинамічних характеристик реакції показало, що у системі спостерігається ентальпійно-ентропійний компенсаційний ефект, кількісні характеристики якого залежить від полярності розчинника. Добуті результати дають змогу для створення прогностичної моделі реакції нуклеофільного розкриття циклу оксирану, що є основою оптимізації умов цілеспрямованого синтезу.

Синтез біосумісних полімерних гідрогелів та дослідження кінетики вивільнення лікарських засобів

Качур А.В.¹, Слісенко О.В.²

¹ПВНЗ “Київський медичний університет”, вул. Бориспільська, 2, 02099 Київ

²Інститут хімії високомолекулярних сполук НАН України, Харківське ш., 48, 02155 Київ
e-mail: a.kachur.st@kmu.edu.ua

Сучасним трендом фармацевтичної хімії є створення біосумісних полімерних гідрогелів для використання як систем трансдермальної доставки ліків та активних речовин в організм людини. Поліакриламід займає провідне місце в синтезі біосумісних гідрогелів. Так, в дослідженні [1] розроблено нову систему доставки амоксициліну гідрогелем на основі поліакриламиду, крохмалю та желатину, яка характеризується значним набряканням та тривалим вивільненням антибіотика в умовах, аналогічних шлунково-кишковому тракту, що свідчить про перспективність використання поліакриламідних гідрогелів для підвищення терапевтичної ефективності лікарських засобів. Автори [2] запропонували синтез штучної барабанної перетинки з гідрогелю на основі поліакриламиду та желатину для лікування гострого і хронічного отиту середнього вуха та прискорення регенерації тканини барабанної перетинки. Поліакриламід у складі гідрогелю забезпечує високу біосумісність, фізичну стійкість і гнучкість матеріалу, що дозволяє максимально наблизити механічні властивості штучної перетинки до природної тканини. Таким чином, метою даної роботи є синтез біосумісних гідрогелів в присутності антисептичних препаратів, таких як фурацилін і метиленовий синій, дослідження структури синтезованих матеріалів, а також вивчення кінетики вивільнення лікарських засобів зі зразків гідрогелів.

Для отримання гідрогелів на основі поліакриламиду (ПААМ) та антисептиків – фурациліну (Ф) або метиленового синього (МС) – використовувався метод вільнорадикальної полімеризації акриламиду (ААМ) в присутності зшиваючого агента бісакриламиду (БААМ, 5 мас.%), реакцію проводили у водному середовищі з додаванням ініціатора – персульфату амонію $((\text{NH}_4)_2\text{S}_2\text{O}_8, 5 \text{ мас.}\%)$. В результаті були отримані зразки ПААМ-Ф і ПААМ-МС із вмістом антисептичного засобу 10 і 25 мас.%. Формування сітчастої структури гідрогелів в результаті полімеризації ААМ в присутності Ф і МС підтверджували методом ІЧ-спектроскопії. Про завершення процесу полімеризації і формування сітчастої структури ПААМ свідчить відсутність на спектрах смуг 3080 і 2975 см^{-1} , що характеризують коливання С-Н зв'язків $=\text{CH}_2$ і $=\text{CH}-$ груп. На ІЧ-спектрах зразків ПААМ-Ф і ПААМ-МС присутні смуги поглинання характерні для акриламідних фрагментів макроланцюгів: смуга 3420-3426 см^{-1} ($\nu_{\text{as}}\text{NH}$), 3190-3194 см^{-1} ($\nu_{\text{s}}\text{NH}$), 2923-2928 см^{-1} (νCH), 1613-1619 см^{-1} (δNH), 1665-1667 см^{-1} ($\nu_{\text{s}}\text{C=O}$) і 1406-1410 см^{-1} (νCN) [3]. Введення антисептичних препаратів викликає появу типових смуг поглинання Ф (1023, 1250, 1200, 970, 1718, 1585 см^{-1}) або МС (1500-1400, 1600, 1252, 1224 см^{-1}). Кінетику вивільнення Ф і МС досліджували методом УФ-спектроскопії за допомогою калібрувального графіка побудованого за зміною оптичної густини хвилі 375 нм для Ф та 612 і 668 нм для МС.

[1] Poyraz, Y., Baltacı, N., Hassan, G., Alayoubi, O. Uysal B.Ö., Pekcan Ö. Composite Hydrogel of Polyacrylamide/Starch/Gelatin as a Novel Amoxicillin Delivery System. *Gels* 2024, 10(10), pp.625-638.

[2] Kim, S., Goo, W., Karima, G., Lee, JH, Kim, HD. Polyacrylamide/Gel-Based Self-Healing Artificial Tympanic Membrane for Drug Delivery of Otitis Treatment. *Biomater Res.* 2024, 1(28), 0049.

[3] Magalhães, A., Neto, M., Bezerra, M., Ricardo, N., Feitosa, J. Application of FTIR in the Determination of Acrylate Content in Poly(Sodium Acrylate-co-Acrylamide) Superabsorbent Hydrogels. *Quim. Nova.* 2012, 35 (7), pp. 1464-1467.

Фотоініційоване аеробне селеніювання амідів ненасичених карбонових кислот диселенідами

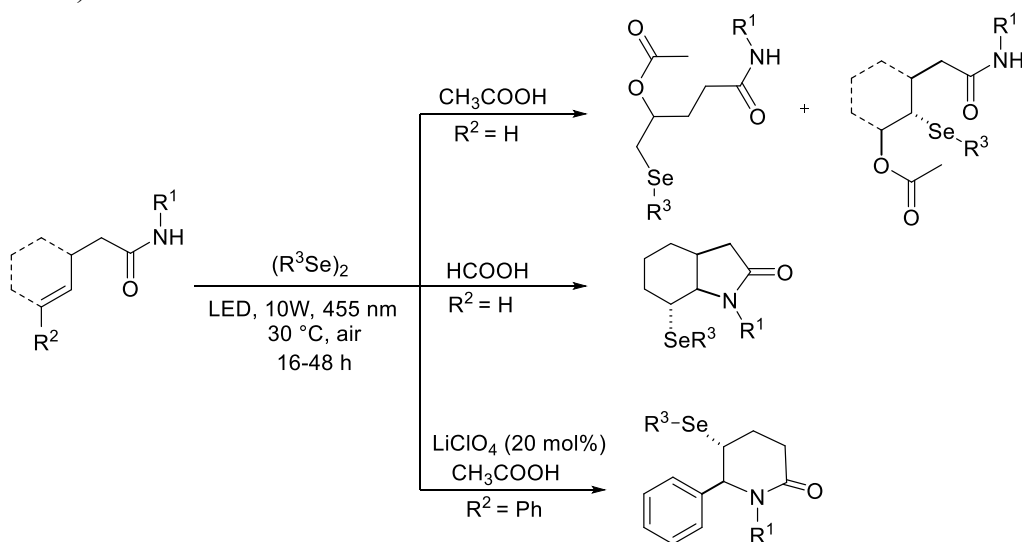
Анастасія Мисяк,^{1,2} Алла Васькевич,¹ Михайло Вовк¹

¹Інститут органічної хімії Національної академії наук України,
вул. Академіка Кухаря, 5, 02094 Київ

² Національний технічний університет України
«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»,
пр-т Перемоги, 37, корпус 4, 03056 Київ
e-mail: a.yu.vaskevich@gmail.com

В контексті конструювання селеновмісних структур як потенційних біоактивних сполук, а також як будівельних блоків для подальших трансформацій, перспективним є поєднання в одній молекулярній платформі sp^3 -збагачених гетероциклічних ядер із органоселенільними угрупованнями. Поширений метод їх одержання базується на реакціях прямого селеніювання базових гетероциклічних систем різноманітними селеніюючими реагентами. Інший підхід включає реакції селеніювання-циклізації відносно простих і доступних ациклічних та гетероциклічних попередників. Зокрема, ненасичені карбоксаміди (N-алкеніл- та алкенілкарбонових кислот) є зручними субстратами для конструювання гідрованих азотистих гетероциклів за допомогою реакцій внутрішньомолекулярної циклізації [1,2].

В поданому дослідженні ми представляємо нові протоколи аеробного LED-ініційованого циклоселеніювання амідів аліл-, циклогексеніл- та циннамільоцтових кислот діорганілдиселенідами з використанням екологічно релевантних мурашиної або оцтової кислот в ролі розчинника. Встановлено, що в залежності від особливостей будови алкенільного субстрату та реакційних умов процес перебігає як тандемне трикомпонентне спряжене приєднання до кратного $C=C$ зв'язку селеніюючого реагента і розчинника, або як селеноциклізація: О-циклізація з утворенням імінолактонів/лактонів та N-циклізація за 5-*exo-trig* або 6-*endo-trig* типом, що приводить до селенілфункціоналізованих пергідроіндолонів та піперидинонів відповідно. Для останніх оцінено протиракову активність та виявлено високу селективність щодо клітин НСТ (колоректальний рак) і HeLa (рак яєчників).



[1] Robin, S. Electrophilic cyclization of unsaturated amides. *Tetrahedron*, 1998, 54, pp 13681-13736.

[2] Godoi, B., Schumacher, R. F., Zeni, G. Synthesis of heterocycles via electrophilic cyclization of alkynes containing heteroatom. *Chem. Rev.* 2011, 111, pp 2937-2980.

Дослідження параметрів пористої структури препаратів діосмектиту

Плетеницька Т.О.¹, Боднарчук О.В.¹¹ Івано-Франківський національний медичний університет, вул. Галицька, 2, 76000 Івано-Франківськ.e-mail: Pletenytska_Te@ifnmu.edu.ua

Текстурні характеристики, зокрема питома поверхня та пористість, є ключовими параметрами, що визначають адсорбційну здатність та терапевтичну ефективність препаратів діосмектиту [1]. Ці показники безпосередньо впливають на здатність препарату зв'язувати токсини, патогенні мікроорганізми та інші шкідливі речовини в шлунково-кишковому тракті [2-3].

Результати визначення питомої поверхні методом BET та загального об'єму пор для трьох досліджуваних препаратів діосмектиту представлені в табл. 3.1. Отримані дані демонструють відмінності між препаратами різних виробників.

Табл.1 Характеристики досліджуваних препаратів діосмектиту

Параметр	Смекта	Ентеросмектит	Діосмектит-Здоров'я
SBET, м ² /г	485 ± 24	412 ± 18	456 ± 22
VΣ, см ³ /г	0.324 ± 0.016	0.289 ± 0.012	0.308 ± 0.015
Vm (t-plot), см ³ /г	0.142 ± 0.008	0.128 ± 0.006	0.135 ± 0.007
Sext, м ² /г	198 ± 12	165 ± 9	184 ± 11
Середній діаметр пор, нм	2.67 ± 0.13	2.81 ± 0.11	2.70 ± 0.12

Смекта (Beaufour Ipsen Pharma, Франція) характеризується найвищою питомою поверхнею 485 ± 24 м²/г, що перевищує мінімальні вимоги Європейської фармакопеї (≥400 м²/г). Загальний об'єм пор 0.324 ± 0.016 см³/г вказує на оптимально розвинену пористу структуру.

Ентеросмектит (ПрАТ "Фармацевтична компанія "Здоров'я", Україна) демонструє нижчі значення питомої поверхні (412 ± 18 м²/г) та загального об'єму пор (0.289 ± 0.012 см³/г), але відповідає фармакопейним вимогам.

Діосмектит-Здоров'я (ТОВ "Здоров'я", Україна) займає проміжне положення з питомою поверхнею 456 ± 22 м²/г та загальним об'ємом пор 0.308 ± 0.015 см³/г.

Всі три препарати відповідають критерію мінімальної питомої поверхні ≥400 м²/г. Середній діаметр пор 2.67-2.81 нм забезпечує ефективну адсорбцію токсинів різного розміру. Коефіцієнт варіації 3-5% підтверджує відтворюваність методики та стабільність якості препаратів.

Дослідження текстурних характеристик трьох препаратів діосмектиту показало, що всі вони відповідають вимогам Європейської фармакопеї щодо мінімальної питомої поверхні ≥400 м²/г. Оригінальний препарат Смекта демонструє найвищі значення питомої поверхні (485 м²/г) та загального об'єму пор (0.324 см³/г), що підтверджує його еталонний статус. Українські препарати Ентеросмектит та Діосмектит-Здоров'я характеризуються близькими до оригінального препарату показниками і забезпечують необхідну адсорбційну здатність для ефективної терапії шлунково-кишкових розладів.

[1] Johansson, J., Sparén, A., Wikström, H., Tajarobi, P., Koch, R., Lundin, P., Xu, M. L. Optical porosimetry by gas in scattering media absorption spectroscopy (GASMAS) applied to roller compaction ribbons. *International Journal of Pharmaceutics* 2021, 592, 120056.

[2] Gao, Z., Duan, L., Hu, Q., Xiong, S., Zhang, T. Effect of shale sample particle size on pore structure obtained from high pressure mercury intrusion porosimetry. *Geofluids* 2021, 2021 (1), 5581541.

[3] Dim, P. E., Rigby, S. P. Characterization of Sandstone Pore Network using Mercury Porosimetry, Helium Porosimetry and Scanning Electron Microscopy. *Journal of Engineering Science & Technology Review* 2022, 15 (2). 4381541

Несиметричні дііміди перилен-3,4,9,10-тетракарбонової кислоти для застосування у хімії метал-органічних каркасів: синтез та спектральні властивості

Радіонов П.М., Кулик О.Г., Татарець А.Л.

Інститут хімії функціональних матеріалів

НТК «Інститут монокристалів» НАН України, пр. Науки, 60, 61072, Харків

e-mail: radpetromikh@gmail.ua

Метал-органічні каркаси (metal-organic frameworks, MOF) – це пористі матеріали, в яких іони металів або металеві кластери зв'язані з органічними лігандами, утворюючи регулярну пористу структуру. Внутрішня поверхня таких каркасів переважно складається з координаційно насичених ділянок, тоді як зовнішня поверхня містить різне співвідношення ненасичених металевих та органічних ділянок. Така будова забезпечує значну площу як внутрішньої, так і зовнішньої поверхні.

Оцінка структури поверхні MOF має важливе значення для визначення спектру їх можливих застосувань. У літературі описані роботи, де досліджувалася можливість використання похідних перилен-3,4,9,10-тетракарбонової кислоти для виявлення та кількісної оцінки координаційно ненасичених центрів в MOF [1].

Метою нашої роботи було розробити метод синтезу та отримати несиметричні дііміди перилен-3,4,9,10-тетракарбонової кислоти (**1a**) та (**1c**), а також вивчити їхні спектральні властивості. Отримані результати планується використати для подальших досліджень зовнішньої поверхні MOF. Також їх можна використати для вивчення будови подібних структур.

Синтез цільових сполук здійснювали за схемою 1. Через низьку розчинність сполуки **2a** її використання для подальших перетворень було неефективним, тому для синтезу несиметричних діімідів використовували сполуку **2b**. Структуру всіх одержаних сполук підтверджували методом ^1H та ^{13}C ЯМР спектроскопії, а їхні спектри поглинання та флуоресценції вимірювали у хлороформі та в твердому стані.

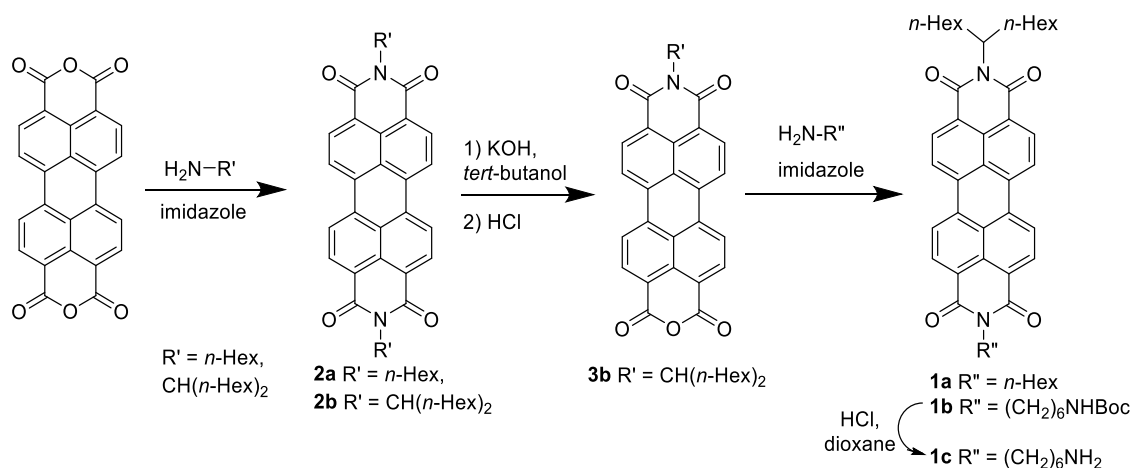


Схема 1. Синтез несиметричних діімідів перилен-3,4,9,10-тетракарбонової кислоти.

Роботу виконано за підтримки НАН України, проєкт № 0125U000603.

[1] S. Wuttke, C. Dietl, F. M. Hinterholzinger et al. Turn-on fluorescence triggered by selective internal dye replacement in MOFs. Chem. Commun., 2014,50, 3599-3601.

Синтез азаадамантану через фрагментацію ретро-Барб'є

Стаднічук Т.С., Гунченко П.О.

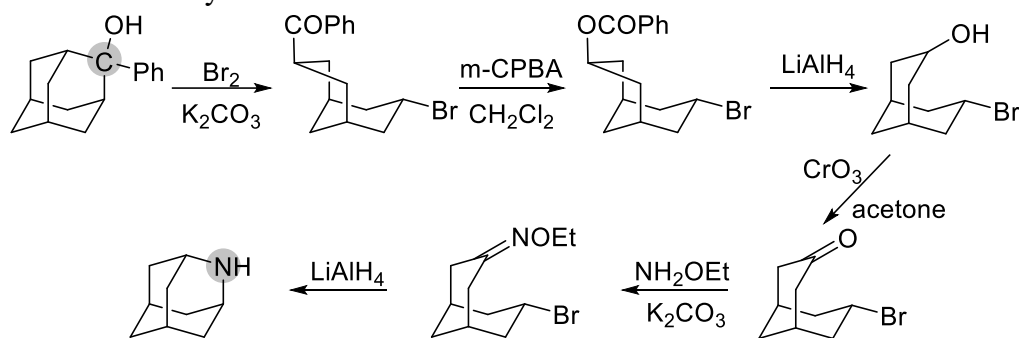
НТУУ «КПІ ім. Ігоря Сікорського», пр. Берестейський, 37, 03056, м. Київ

e-mail: stadnichuk.timofey@iit.kpi.ua

Наноалмази, як перспективні матеріали в наноелектроніці, мають властивості ізоляторів, тоді як введення гетероатомів у їх структуру (допування) призводить до суттєвої зміни їх електронних властивостей. В той же час, існують певні складнощі як з введенням точної кількості гетероатомів, так і з неоднорідностями наноалмазів з хімічної точки зору, в першу чергу, їх розмірами, що робить їх незручними об'єктами дослідження з точки зору органічної хімії.

Найменший представник діамондоїдів, адамантан, став однією з найпопулярніших каркасних сполук, і його властивості вивчені достатньо добре та знайшли широке використання в багатьох галузях хімії, тоді як дослідження гетероадамантанів, зокрема, 2-азаадамантану, гальмується складнощами у їх синтезі.[1]

Нами розроблено нову багатостадійну схему синтезу 2-азаадамантану, в якій ключову роль відіграє фрагментація ретро-Барб'є [2] для розкриття стабільного адамантанового скелету:



Реакція 2-феніл-2-адамантанолу з бромом в присутності K_2CO_3 призводить до фрагментації ретро-Барб'є з утворенням біцикло[3.3.1]нонаної структури. Утворений бромкетон надалі перегрупується за реакцією Байєра–Віллігера до естера, відновлення якого дає відповідний спирт, який окиснюють оксидом хрому (VI) (CrO_3) до кетону. Отриманий кетон взаємодіє з О-етилгідроксиаміном (H_2N-OEt) у присутності K_2CO_3 з утворенням О-алкілоксиму. Заключним етапом є внутрішньомолекулярна циклізація цього проміжного оксиму, в результаті якої відбувається замикання розкритого скелету в аміноциклічну структуру – 2-азаадамантана.

Розроблена схема демонструє ефективну стратегію скелетного редагування адамантанподібних структур, що відкриває новий загальний шлях і до синтезу інших гетероадамантанів.

[1] Fokin, A. A., Sekutor, M., & Schreiner, P. R. The Chemistry of Diamondoids: Building Blocks for Ligands, Catalysts, Pharmaceuticals, and Materials. John Wiley & Sons, 2024.

[2] Zhang, W.-C.; Li, C.-J. A Direct Retro-Barbier Fragmentation. J. Org. Chem. 2000, 65 (18), 5831–5833.

Синтез та спектрально-флуоресцентні властивості нових полієн-заміщених похідних 3-гідроксифлавоу

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

Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна, майдан Свободи, 4, 61022

Харків, Україна

e-mail: arseniysnizko5@gmail.com

Барвники з внутрішньо молекулярним переносом протону (ESIPT), зокрема 3-гідроксифлавоу (ЗНФ), характеризуються двохвильовою емісією та великим Стоксовим зсувом. Це дозволяє використовувати їх для високочутливого ратіометричного зондування локальних змін полярності та в'язкості, утворення водневих зв'язків тощо. Їхня структура легко піддається модифікації для покращення водорозчинності, селективності і фотостабільності. Завдяки цим характеристикам, вони є перспективними для використання в біомедичних флуоресцентних дослідженнях. В роботі вивчено вплив електроноакцепторних карбонільної і 1,1-діціано (diCN) групи, а також вплив довжини 4'- полієнового фрагменту на флуоресцентні властивості зондів на основі ЗНФ.

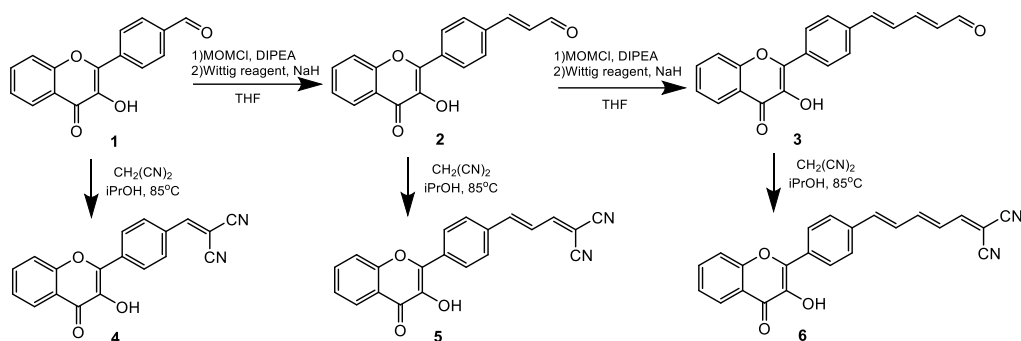


Рис. 1. Схема синтезу нових полієн-заміщених флуоресцентних зондів на основі ЗНФ

Синтезовано ряд нових похідних 3-гідроксифлавоу (Рис. 1), шляхом введення карбонільної та diCN груп, кон'югованих з ядром флавоу через етиленові, бутадієнові та гексатрієнові фрагменти. Спектрально-флуоресцентні дослідження в розчинниках різної природи (циклогексан, толуен, тетрагідрофуран, етилацетат, ацетонітрил і 1,4-діоксан) показали суттєву спектральну чутливість зондів до полярності середовища.

Введення diCN та карбонільної груп приводило до значного батохромного зсуву максимумів поглинання та випромінювання у порівнянні з незаміщеним ЗНФ. У спектрах флуоресценції спостерігалось накладання декількох смуг, що свідчить про складну спектральну поведінку отриманих зондів спричинену взаємним впливом електроноакцепторних кінцевих груп та подовженням π -системи через полієновий ланцюг. Було встановлено, що для отриманих зондів в полярних розчинниках присутня значна конкуренція між ESIPT та фотодисоціацією з утворенням флуоресцентного аніону [1].

Для аналізу електронної структури і передбачення спектрів застосовувалися розрахунки методом TD-DFT. Показано, що батохромний зсув у зондів викликаний насамперед зниженням енергетичного рівня LUMO та впливом акцепторних груп на дипольний момент в збудженому стані.

Проведені дослідження показали перспективність нових ЗНФ зондів, як чутливих багатоканальних сенсорів для біомедичних досліджень.

[1] A.D. Snizhko, L.V. Chepeleva, E.S. Gladkov, A.V. Kyrychenko. Tuning ESIPT in 3-hydroxyflavone by introducing electron-withdrawing dicyano group and extending its π -conjugation. *Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry*, **2025**, 469, 16524.

Дослідження регіоселективності перегрупування Бекмана в ряду бензоанельованих циклоалканонів

Солод Б.Ю., Данилюк І.Ю., Рябухін С.В., Вовк М.В.

Інститут органічної хімії НАН України,

вул. Академіка Кухаря, 5, 02660, Київ, Україна

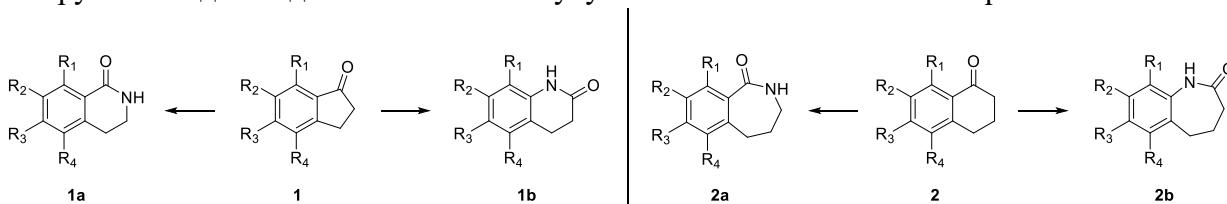
e-mail: dest470@gmail.com

Перегрупування Бекмана, відкрите наприкінці XIX століття, є однією із ключових реакцій в органічній хімії. Воно широко використовується для перетворення оксимів у аміди та їх циклічні аналоги, які відіграють важливу роль у фармацевтиці, матеріалознавстві та агрохімії. Завдяки цій реакції можна ефективно отримувати як низькомолекулярні біоактивні речовини, так і промислово важливі продукти — полімери, лікарські препарати та агрохімікати. Перегрупування Бекмана й н досі зберігає статус універсального та потужного інструменту сучасного органічного синтезу.

Незважаючи на широкі синтетичні можливості цього перетворення, проблема його регіоселективності не втрачає актуальності. Зокрема, для біциклічних арилкетонів із циклопентановими та циклогексановими фрагментами спостерігається низький рівень регіоселективності, що значно обмежує їх практичне використання для спрямованого синтезу регіоізомерних бензолактамів. Саме тому контроль структури отриманих продуктів є критично важливим, оскільки локація циклічного амідного фрагмента може суттєво позначатись на фармакологічному профілю продуктів перегрупування Бекмана.

Нами проведено дослідження регіоселективності перегрупування Бекмана для ряду бензоанельованих циклоалканонів: 2,3-дигідроінден-1-онів **1** та 3,4-дигідронафталін-1-онів **2**. Особливу увагу приділена з'ясуванню впливу електронної природи донорних, акцепторних та «нейтральних» замісників та їхньому положенню у фенільному ядрі на співвідношення регіоізомерних продуктів. Такий підхід дозволив виявити закономірності, що визначають напрямок перегрупування, та оцінити можливість керування цим процесом шляхом раціонального підбору структури субстратів.

Важливим етапом стала також оптимізація реакційних умов: варіювання розчинників, температурних режимів та каталізаторів. Показано, що завдяки такому комплексному підходу можна суттєво підвищити хемоселективність перебігу реакції та спрямувати її у потрібному напрямку. Це, у свою чергу, за рахунок подальшого відновлення лактамного сайту відкриває перспективи синтезу біциклічних анілінів та бензиламінів із заздалегідь прогнозованою структурою, що робить перегрупування Бекмана привабливим інструментом для медичної хімії та пошуку нових біологічно активних речовин.



Будова проміжних та кінцевих продуктів надійно підтверджена сучасними спектроскопічними методами, зокрема ^1H і ^{13}C ЯМР, ІЧ- та мас-спектрометрією. Отримані дані дозволили впевнено ідентифікувати утворені регіоізомери та підтвердити достовірність виявлених закономірностей.

Таким чином, проведені дослідження не лише розширюють уявлення про механістичні особливості перегрупування Бекмана в ряду бензоциклоалканонів, але й створюють підґрунтя для розробки ефективного підходу до важливих для медичної хімії скафолдів: біциклічних анілінів та бензиламінів.

Синтез, прогноз біоактивності та антимікробна дія похідних піроло[1,2-а]піразин-4,7-дикарбоксилатів

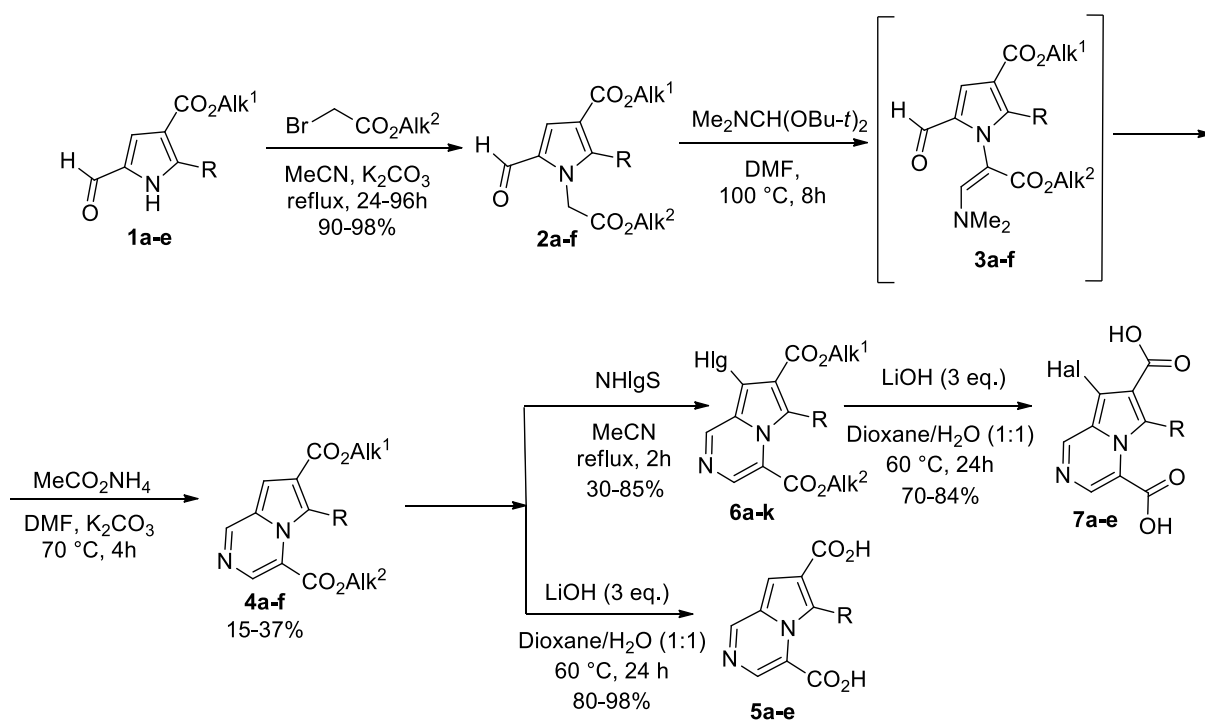
Нечесний Я.І.¹, Кемський С.В.¹, Грозав А.М.², Вовк М.В.¹

¹ Інститут органічної хімії НАН України, вул. Академіка Кухаря, 5, 02094, Київ

² Буковинський державний медичний університет, пл. Театральна, 2, 58002, Чернівці

e-mail: nechesnyy.yaroslav@gmail.com

Піроло[1,2-а]піразини є перспективними об'єктами для медичної та синтетичної хімії. Зокрема, їх похідні з естерною групою в пірольному ядрі продемонстрували протиракову активність, а їх аналоги з естерною функцією в піразиновому циклі виявляють анксиолітичну та протигрибкову дію [1,2]. З огляду на це актуальною видається розробка методу отримання раніше невідомих похідних піроло[1,2-а]піразин-4,7-дикарбоксилатів.



$\text{R} = \text{Alk}, \text{Ar}; \text{Alk}^1 = \text{Me}, \text{Et}; \text{Alk}^2 = \text{Me}, \text{Et}; \text{Hlg} = \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}.$

З доступних альдегідів **1a-e** в три стадії отримували піроло[1,2-а]піразин-4,7-дикарбоксилати **4a-f**, лужний гідроліз яких приводив до дикарбонових кислот **5a-e**. В свою чергу, селективне галогенування сполук **4a-f** було використано для синтезу низки 8-галогенопохідних **6a-k**. Їх гідроліз був вдало використаний для одержання біоорієнтованих галогеновмісних 4,7-дикарбонових кислот **7a-e**.

Оцінка ADMET-параметрів синтезованих сполук *in silico* показала, що значна їх частина відповідає критеріям лідер-подібності. При оцінці антимікробної дії серій сполук **5a-c, e, 6c, f-j**, та **7a-e** було встановлено, що найактивнішою проти *Klebsiella pneumonia*, *Staphylococcus aureus*, та *Bacillus subtilis* виявилась сполука **6f**.

[1] Amărandi, R.-M. et al. Exploring Pyrrolo-Fused Heterocycles as Promising Anticancer Agents: An Integrated Synthetic, Biological, and Computational Approach. *Pharmaceuticals* 2023, 16 (6), 865. <https://doi.org/10.3390/ph16060865>.

[2] Miranda-Sánchez, D. et al. Pyrrole-Based Enaminones as Building Blocks for the Synthesis of Indolizines and Pyrrolo[1,2-a]Pyrazines Showing Potent Antifungal Activity. *Molecules* 2023, 28 (20), 7223. <https://doi.org/10.3390/molecules28207223>

Модифікація підходу оцінки структурної подоби/відмінності молекул у методах 2-NN

Пестерев Є.К.

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

Люстдорфська дорога 86, 65080, Одеса

e-mail: egosyas@gmail.com

Одним із популярних підходів у машинному навчанні є метод k найближчих сусідів (k -NN – k Nearest Neighbours), який використовується для прогнозування значень шуканої властивості об'єкта на базі відомих відповідних властивостей схожих (тобто найближчих до даного об'єкту) об'єктів. Метод базується на припущенні, що близьким об'єктам в ознаковому просторі відповідають схожі мітки. Для оцінки подібності молекул аналізується їх розподіл у структурному просторі. При цьому, значення структурних дескрипторів визначають координати точок, що відповідають молекулам, у просторі, осями якого є дескриптори. Для оцінки близькості між точками використовують різні типи метрик, зокрема, евклідову метрику.

Стандартний метод k -NN враховує відстані та прогнозує невідоме значення властивості Y_X точки X , використовуючи значення відповідної властивості у найближчих до X точок $i_1, i_2, \dots, i_k$. За умови $k = 2$, метод k -NN є простішим випадком лінійної інтерполяції, тобто прогнозоване значення властивості Y_X укладається на прямій ($Y_{i1} - Y_{i2}$). Проте виникає питання, чи дійсно точка X належить згаданій прямій та чи коректне використання інтерполяції у цьому випадку.

В даній роботі було зроблено спробу модифікувати стандартний підхід 2-NN, враховуючи значення кутів між X та комбінаціями із найближчих точок $i_1, i_2, \dots, i_n$. При цьому, чим ближчий кут до 180° тим коректніше використання певної комбінації точок для прогнозу.

Для тестування методу 2-NN та його модифікації була використана вибірка, яка містила 399 різноманітних органічних сполук таких класів, як насичені та ненасичені вуглеводні, гетероциклічні сполуки, ароматичні вуглеводні, спирти, прості та складні етери та їх похідні. В якості досліджуваних властивостей сполук використовувались їх критичні властивості (тиск, температура, об'єм) [1, 2], які є фундаментальними властивостями при дослідженнях фазової поведінки речовин.

Для усіх сполук вибірки проведено розрахунок структурних дескрипторів на 2D рівні моделювання молекулярної структури у рамках симплексного підходу [3]. Для диференціації вершин симплексів використовувалися не тільки мітки, що відображали природу атомів, але й інші атомні характеристики, зокрема, частковий заряд, поляризуємість, електронегативність, ліпофільність тощо. Попередньо, використовували відсів взаємнокорелюючих параметрів і метод транд-вектора для зменшення кількості структурних дескрипторів, щоб уникнути проблеми «прокляття розмірності».

Порівняння статистичних характеристик прогнозу стандартного і модифікованого методів у всіх випадках критичних властивостей сполук показало кращі результати модифікованого підходу, що підтверджує необхідність аналізувати не тільки найближчі точки за відстанню, але й їх взаємне розташування.

[1] Reid R.C., Prausnitz J. M., Poling B. E. The properties of gases and liquids. McGraw-Hill, 1987. 741 p.

[2] Пестерев Є., Огніченко Л., Артеменко А. та ін. Кількісний аналіз зв'язку між структурою та критичними властивостями індивідуальних органічних сполук. Праці Одеського політехнічного ун-ту. 2025, №1 (71). С. 220–234, DOI: 10.15276/opu.1.71.2025

[3] Kuz'min V., Artemenko A., Ognichenko L. et al. Simplex Representation of molecular structure as universal QSAR/QSPR tool. Struct. Chem. 2021, Vol. 32 (4). P. 1365–1392. DOI: 10.1007/s11224-021-01793-z.

Машинне навчання на основі даних ДНК-кодованих бібліотек: пошук хітів у надвеликих хімічних просторах на прикладі Carbonic anhydrase IX

Капелюха А.О.¹, Тарханова О.О.², Мороз Ю.С.^{1,3}

¹ Київський національний університет ім. Тараса Шевченка, вул. Володимирська, 60, 01061 Київ

² ТОВ «Кемспейс», вул. Академіка Кухаря, 7, 02094 Київ

³ ТОВ НВП «Снамін», вул. Вінстона Черчилля, 78, 02094 Київ

e-mail: kapeluha.ann00@gmail.com

ДНК-кодовані бібліотеки (DNA-Encoded Libraries, DELs), завдяки здатності генерувати великі масиви структурованих даних, привертають дедалі більшу увагу фахівців у галузі машинного навчання як цінне джерело даних для побудови моделей. У цій роботі ми демонструємо приклад успішного застосування регресійної моделі, натренованої на даних DEL, для дослідження Enamine REAL - надвеликого хімічного простору, що налічує понад 33 мільярди молекул. У даному дослідженні використано публічно доступний набір даних тестування бібліотеки DOS-DEL-1 на ферменті карбоангідраза IX (CAIX) [1], що забезпечує відтворюваність результатів і можливість порівняння з попередніми роботами. Основною метою було відтворити методологію, описану в літературі [2], із внесенням низки модифікацій та проаналізувати ключові принципи роботи з даними ДНК-кодованих бібліотек.

Для підготовки даних до моделювання застосовано метод агрегації дисинтонів, що дозволило виявити підструктури, важливі для зв'язування з мішенню, та зменшити обсяг даних і обчислювальне навантаження. Підготовлені дані було використано для тренування глибинних нейронних мереж із задачею регресійного передбачення енрічменту, який корелює з афінністю молекул до білка. Подальше тестування здатності моделі здійснювати відбір потенційно активних молекул із надвеликих хімічних просторів проведено на базі ChEMBL-32. Серед 100 сполук з найвищим передбаченим енрічментом 28 ановані як ті, що мають активність до CAIX, що відповідає 28% і підтверджує ефективність моделі.

Натреновану модель було застосовано до комбінаторного простору Enamine REAL. За результатами передбачення було відібрано топ-1 мільйон молекул, до яких додатково застосовано фільтри за фізико-хімічними параметрами. Подальша кластеризація дозволила сформулювати репрезентативну підмножину зі 352 структурно різноманітних речовин для експериментальної перевірки.

Експериментальне тестування здійснювалося поетапно. На першому етапі всі відібрані сполуки було перевірено методом Thermal shift assay, який ідентифікував 268 первинних хітів (76% протестованих молекул). З них 88 сполук із найбільшими тепловими зсувами було додатково підтверджено у чотирьох повторях. На фінальному етапі 15 найперспективніших сполук протестовано в Esterase activity inhibition assay, де отримано значення IC₅₀ у діапазоні 0,07–0,53 μM, що свідчить про високу активність цих молекул.

[1] Gerry, C. J.; Wawer, M. J.; Clemons, P. A.; Schreiber, S. L. DNA Barcoding a Complete Matrix of Stereoisomeric Small Molecules. *Journal of the American Chemical Society* **2019**, 141 (26), 10225–10235. <https://doi.org/10.1021/jacs.9b01203>.

[2] McCloskey, K.; Sigel, E. A.; Kearnes, S.; Xue, L.; Tian, X.; Moccia, D.; Gikunju, D.; Bazzaz, S.; Chan, B.; Clark, M. A.; Cuozzo, J. W.; Guie, M.-A.; Guiling, J. P.; Huguet, C.; Hupp, C. D.; Keefe, A. D.; Mulhern, C. J.; Zhang, Y.; Riley, P. Machine Learning on DNA-Encoded Libraries: A New Paradigm for Hit Finding. *Journal of Medicinal Chemistry* **2020**, 63 (16), 8857–8866. <https://doi.org/10.1021/acs.jmedchem.0c00452>.

Ацетоліз епіхлоргідрину при каталізі триалкіламінами: вплив структури на кінетику і регіоселективність реакції

Тарасенко В.В.¹, Ютілова К.С.², Швед О.М.³, Розанцев Г.М.¹

¹Донецький національний університет імені Василя Стуса, 600-річчя.21, 21021 Вінниця

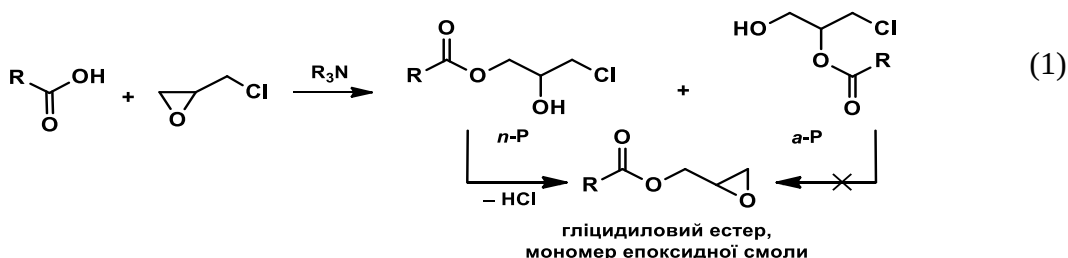
²Інститут органічної хімії НАНУ, Академіка Кухаря, 5, 02660 Київ

³Інститут фізико-органічної хімії і вуглехімії ім. Л. М. Литвиненка НАНУ, Харківське ш.,50, 02155 Київ

e-mail: v.tarasenko@donnu.edu.ua

Трансформація оксиранового циклу різноманітними кислотними реагентами дає змогу одержувати продукти, що мають три функціональні групи. Це робить дану реакцію перспективною в синтезі низки фармацевтичних препаратів, гетеро- і карбоциклів, епоксидів з різноманітним призначенням. Цілеспрямований синтез таких речовин базується на дослідженнях швидкості та регіоселективності реакції.

Метою роботи є дослідження ацетолізу епіхлоргідрину (ЕХГ) при каталізі триалкіламінами (R_3N), що ефективно прискорюють реакцію (1). Розкриття оксиранового циклу відбувається з утворенням двох продуктів – нормального (*n*-P) та аномального (*a*-P) приєднання, з яких лише *n*-P перетворюється на епоксид. На каталітичну активність R_3N та регіоселективність реакції за їх участю суттєво впливають такі властивості амінів, як основність, нуклеофільність, стерео- та електронна будова [1]. Для дослідження впливу саме цих параметрів на реакцію (1) підібрана низка амінів: Et_3N , $(n-Bu)_3N$, $Me(n-Oct)_2N$, $(n-Oct)_3N$ і Me_2PhN , які відрізняються наборами вказаних характеристик.



Контроль за ходом реакції здійснювали за витрачанням оцтової кислоти при 333 К у розчиннику ЕХГ:ТГФ (1:1 за об.). Реакція досліджена в значному надлишку ЕХГ. Наявність ТГФ у розчинник знижує його полярність, що прискорює реакцію розкриття циклу, механізм якого має S_N2 характер. Кінетичні дослідження включали вплив концентрації каталізатора, встановлення порядків реакції за оцтовою кислотою та амінами, кінетичного закону реакції, обчислення спостережуваних і каталітичних констант швидкості. Співставлення каталітичних констант швидкості з параметрами, що характеризують основні, нуклеофільні властивості, стерео- і електронну будову амінів, проведені методом кореляційного аналізу за рівняннями Бренстеда і Тафта. Встановлено, що в більшій мірі на каталітичну активність амінів впливає їх нуклеофільність та основність.

Регіоселективність реакції досліджена за допомогою 1H ЯМР спектроскопії за співвідношенням інтегральних інтенсивностей метинових протонів *a*-P та метильних протонів в обох продуктах. Показано, що вміст *a*-P зменшується із зростанням нуклеофільності амінів та зменшенням стеричного чинника в їх будові. Сукупність кінетичних та спектральних досліджень реакції (1) дає змогу для створення моделі керованого органічного синтезу.

[1] Yutilova K., Tkach A., Tarasenko V., Shved E. (2024) Finding the right balance between tertiary amine steric effect and solvent polarity for the regioselectivity and kinetics of epichlorohydrin acetolysis. Wiley. *Journal of Physical Organic Chemistry*, 37 (2024). <https://doi.org/10.1002/poc.4573>

Оцінка афінітету похідних триптантрину до SARS-CoV2 та SARS-CoV1

Радудік А.В.^{1,2}, Кічова М.Є.², Шевченко О.В.¹, Карпенко О.С.², Златов Є.В.^{1,2}

¹Одеський національний університет ім. І.І. Мечникова, вул В.Змієнка, 2, 65000, Одеса

²Фізико-хімічний інститут ім. О.В. Богатського НАН України, Люстдорфська дорога, 86, 65080, Одеса

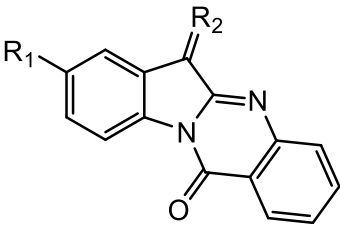
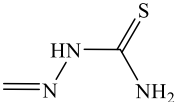
e-mail: alevtina200154@gmail.com

Пошук нових противірусних препаратів завжди був актуальним, а після спалаху коронавірусної хвороби (COVID-19), яка спричинила масову епідемію у 2019 році, питання пошуку нових, більш ефективних, лікарських препаратів стало ще актуальніше.

Раніше була продемонстрована противірусна активність триптантрину (**1**, індола[2,1-*b*]хіназолін-6,12-діону) та його похідних відносно вірусів грипу, тютюнової мозаїки та COVID-19 [1], а також зазначено, що подальша функціоналізація **1** може збільшити афінність до ферментів SARS-CoV (1-2), що має збільшувати загальний противірусний ефект. Були розглянуті потенційні терапевтичні агенти, для більшості з яких нами була показана протизапальна активність та знайдено мішені – ферменти родини JNK [2].

Значення оціночних функцій (ΔG , ккал/моль) молекулярного докінгу для досліджених сполук з мішенями головної протеази SARS-CoV2 та SARS-CoV1 (Protein Data Bank: 6LU7 та 4WY3 відповідно), були отримані за допомогою програмного забезпечення MzDOCK та AUTODOCK VINA (Табл.1). У якості сполук порівняння використовувалися противірусні препарати Аміксин (10) і Метісазон (9). ΔG синтезованих сполук знаходяться в проміжку від -6,2 до -8,4 ккал/моль, що вказує на середню здатність інгібування вказаних мішеней. Отримані оціночні функції у подальшому можуть бути розглянуті у якості досліджуваної властивості для проведення QSAR-аналізу.

Табл.1. ΔG синтезованих та контрольних сполук з мішенями.

									
Сполука	R ₁	R ₂	ΔG_{4WY3}	ΔG_{6LU7}	Сполука	R ₁	R ₂	ΔG_{4WY3}	ΔG_{6LU7}
1	-H	=O	-6,4	-7,2	6	-Ph	=N-OH	-7,1	-8,4
2	-H	=N-OH	-7,0	-7,5	7	-OH	=O	-7,2	-7,6
3	-OCH ₃	=O	-7,2	-7,8	8	-H		-7,4	-8,4
4	-OCH ₃	=N-OH	-7,0	-7,5	9	-	-	-5,8	-6,0
5	-Ph	=O	-7,2	-8,0	10	-	-	-5,2	-6,1

[1] Yurngdong J. Progress in the studies on tryptanthrin, an alkaloid of history. Arch. Pharm. Res. 2013, 36, 517–535.

[2] Schepetkin, I. A., Karpenko, O. S., Kovrizhina, A. R., Kirpotina, L. N., Khlebnikov, A. I., Chekal, S. I., Radudik, A. V., Shybinska, M. O., Quinn, M. T. Novel Tryptanthrin Derivatives with Selectivity as c-Jun N-Terminal Kinase (JNK) 3 Inhibitors. Molecules, 2023, 28 (12), 4806.

**ФІЗИЧНА, НЕОРГАНІЧНА, АНАЛІТИЧНА
ХІМІЯ ТА МАТЕРІАЛОЗНАВСТВО**

Каталітичні властивості вуглецевих наноматеріалів у гідруванні органічних субстанцій

Бичко І.Б.¹

¹ Інститут фізичної хімії ім. Л.В.Писаржевського НАН України, проспект Науки 31, 03028 Київ

e-mail: igorbychko@ukr.net

Розроблено наукові засади створення каталізаторів гідрування на основі вуглецевих наноматеріалів. Виявлено основні чинники, які визначають каталітичну дію вуглецевих наноматеріалів у реакціях гідрування органічних сполук у газовій та рідкій фазах. Представлено новий тип активних центрів дегідрування метанолу для вуглецевих наноматеріалів. Розвинуто напрям створення ефективних нанофазних каталізаторів на основі вуглецевих наноматеріалів для гетерогенно-каталітичних процесів.

На підставі дослідження каталітичних властивостей вуглецевих та вуглецевмісних матеріалів вперше експериментально показано здатність вуглецевих наноматеріалів проявляти каталітичну активність у реакціях гідрування та показано, що найбільша каталітична активність досягається для графітизованих вуглецевих наноматеріалів та матеріалів з розвиненою поверхневою π -спряженою системою, такими як поліанілін. Встановлено, що вуглецеві наноматеріали характеризуються високою стабільністю при гідруванні ненасичених сполук та показано, що збільшення вмісту кисню у структурі вуглецевих матеріалів та збільшення вмісту аморфної фази призводять до зменшення каталітичної активності.

Вперше продемонстровано здатність поліаніліну проявляти каталітичну активність у реакціях гідрування. Показано, що активність поліаніліну суттєво залежить від температури його обробки. Термоструктурований поліанілін проявляє каталітичну активність у газофазному гідруванні етилену, гідруванні нітросполук та сполук з $C=C$ зв'язком у рідкій фазі.

На основі порівняння швидкостей гідрування сполук з ненасиченим подвійним зв'язком у рідкій та у газовій фазах показано, що збільшення каталітичної активності вуглецевого наноматеріалу у гідруванні етилену призводить до симбатного збільшення каталітичної активності у гідруванні ненасичених органічних сполук у рідкій фазі, що узгоджується з принципом лінійних співвідношень вільних енергій. Показано, що така симбатна залежність також в певних межах виконується для гідрування нітросполук у рідкій фазі. На прикладі гідрування 4-нітротолуолу у присутності вуглецевих нанотрубок показано, що процес гальмується водою. Проведення процесу у присутності протоногенних сполук призводить до зменшення швидкості гідрування, в той час як протоноакцепторні речовини, такі як піридин, сприяють її збільшенню, що пов'язано з транспортуванням атомарного водню. Експериментальним шляхом показано, що повторне використання ВНТ у гідруванні 4-нітротолуолу призводить до зменшення конверсії, що може бути обумовлено дезактивацією ВНТ внаслідок окиснення поверхні нітрогрупою.

Запропоновано методики синтезу $Ni@VNT$ з використанням методу імпрегнування, що призводить до утворення наночастинок Ni , інкапсульованих у зовнішніх стінках ВНТ та повністю покритих вуглецем, що запобігає контакту Ni з повітрям та реакційним середовищем. Виявлено що перенесення заряду в таких каталізаторах з металу на ВНТ відіграє ключову роль у регулюванні каталітичної активності $Ni@VNT$.

Дослідження профінансовано Національною академією наук України (тема «Розвиток наукових засад створення каталізаторів на основі вуглецевих та металоксидних наноматеріалів для гетерогенно-каталітичних процесів отримання важливих органічних сполук» № 0124U00959).

Вплив природи лігандів та протийонів на люмінесценцію катіонних, нейтральних та аніонних комплексів Eu(III) з фосфорильними лігандами

Стругацька М.Б.¹, Каряка Н.С.¹, Труш В.О.¹, Смола С.С.², Русакова Н.В.², Дьяконенко В.В.³, Шишкіна С.В.^{3,4}, Амірханов В.М.¹

¹ Хімічний факультет Київського національного університету імені Тараса Шевченка, вул. Гетьмана Павла Скоропадського, 12, Київ 01033, Україна

² Фізико-хімічний інститут ім. О.В. Богатського НАН України, вул. Люстдорфська дорога, 86, Одеса 65080, Україна

³ Науково-технологічний комплекс “Інститут монокристалів” НАН України, пр. Науки, 60, Харків 61072, Україна

⁴ Інститут органічної хімії НАН України, вул. Академіка Кухаря, 5, Київ 02094, Україна
e-mail: mariia.struhatska@univ.net.ua

У роботі представлені результати люмінесцентних та структурних досліджень ряду комплексів Eu^{III} з карбациламідофосфатними (КАФ) та сульфоніламідофосфатними (САФ) лігандами. Наявність у складі КАФ і САФ лігандів бідентатно-донорних функціональних фрагментів C(O)NP(O) і S(O)₂NP(O) відповідно, обумовлює можливість утворення стійких металокомплексів за рахунок хелатування йонів металу атомами кисню. За наявності спряжених систем у замісниках при функціональних фрагментах ліганди такого типу можуть ефективно сенсibilізувати f-f люмінесценцію йонів лантаноїдів [1].

Нами було синтезовано і досліджено такі типи сполук європію: аніонні тетракіс-комплекси з трьома типами катіонів на основі КАФ ліганду (Kat[Eu(КАФ)₄]), катіонні змішанолігандні комплекси на основі двох типів КАФ і одного САФ ліганду з додатковим лігандом 2,2'-біпіридином ([EuL₂Dipy₂]An), нейтральні змішанолігандні трис-КАФ комплекси з 2,2'-біпіридином ([Eu(КАФ)₃Dipy]), нейтральні змішанолігандні нітрат-вмісні комплекси з КАФ лігандом і 2,2'-біпіридином ([Eu(КАФ)₂Dipy(NO₃)]). Для одержаних сполук проведено порівняльний аналіз фотолюмінесцентних характеристик, таких як відносна інтенсивність і мультиплетність смуг емісії (рис. 1), ефективність сенсibilізації емісії, внутрішні квантові виходи, час життя збудженого стану, та, для деяких із досліджених комплексів, загальні квантові виходи. Запропоновано кореляційні залежності впливу на перелічені параметри найближчого координаційного оточення йона європію, а також природи зовнішньосферних йонів. Виявлені закономірності дозволяють сформулювати принципи дизайну люмінофорів на основі йонів лантаноїдів з перспективою їх застосування у новітніх технологіях (OLED, сенсори, біомаркери для діагностики та ін.).

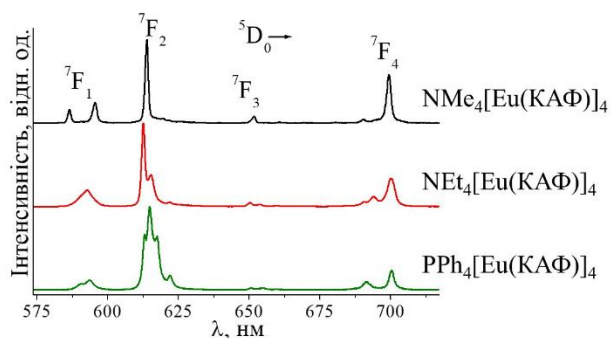


Рис. 1. Спектри 4f-емісії аніонних тетракіс-КАФ комплексів Eu^{III} з трьома типами протийонів у кристалічному стані ($\lambda_{36} = 394$ нм, T = 298 К).

[1] Amirkhanov, V.; Ovchinnikov, V.; Trush, V.; Gawryszewska, P.; Jerzykiewicz, L. B. Powerful new ligand systems: carbacylamidophosphates (CAPH) and sulfonylamidophosphates (SAPH). In *Ligands: Synthesis, Characterization and Role in Biotechnology*; Nova Science Publishers, Inc., New York, 2014, pp. 199-248.

Люмінесценція іонів Dy^{III} та Tm^{III} у комплексах на основі карбациламідифосфатів

Каряка Н.С.¹, Смола С.С.², Гавришевська П.³, Амірханов В.М.¹

¹ Хімічний факультет Київського національного університету імені Тараса Шевченка,
вул. Павла Скоропадського 12, 01033 Київ

² Фізико-хімічний інститут імені О.В. Богатського НАН України, Люстдорфська дорога
86, 65080 Одеса

³ Вроцлавський університет, вул. Ф. Жоліо-Кюрі 14, 50-383, Вроцлав, Польща
e-mail: Nataliia.Kariaka@knu.ua

Люмінесцентні та магнітні властивості іонів лантанодів обумовлюють актуальність одержання та вивчення їх координаційних сполук. Зокрема, комплекси диспрозію та тулію представляють інтерес для технології світло випромінюючих електродіодів, оптичних підсилювачів, систем оптичного зв'язку [1, 2]. Сполуки диспрозію також є перспективними з точки зору отримання моно-молекулярних магнітів для потенційного використання у сучасних технологіях зберігання даних, молекулярній спітроніці та квантових обчисленнях [3]. Органічні ліганди виступають модуляторами магнітних та люмінесцентних властивостей іонів лантанодів, забезпечуючи необхідне координаційне оточення іону та сенсibilізуючи їх емісію.

У даній роботі отримано та досліджено тетракіс-комплекси диспрозію та тулію Cs[LnL¹₄], NEt₄[LnL¹₄], PPh₄[LnL²₄] з феніл-вмісними карбациламідифосфатами (КАФ) – диметил-N-бензоїламідифосфатом (HL¹) та дифеніл-N-бензоїламідифосфатом (HL²), а також трис-L¹ комплекси і додатковими лігандами – трифенілфосфін оксидом (TPPO) та 1,10-фенантроліном (phen) – LnL¹₃TPPO, LnL¹₃phen. Для усіх синтезованих комплексів при кімнатній температурі спостерігається сенсibilізована лігандами f-f люмінесценція (рисунк 1), характеристики якої залежать від природи обраних лігандів та позасферних катіонів. Досліджені комплекси можуть розглядатися як перспективні вихідні речовини для створення люмінесцентних матеріалів для сучасних технологій.

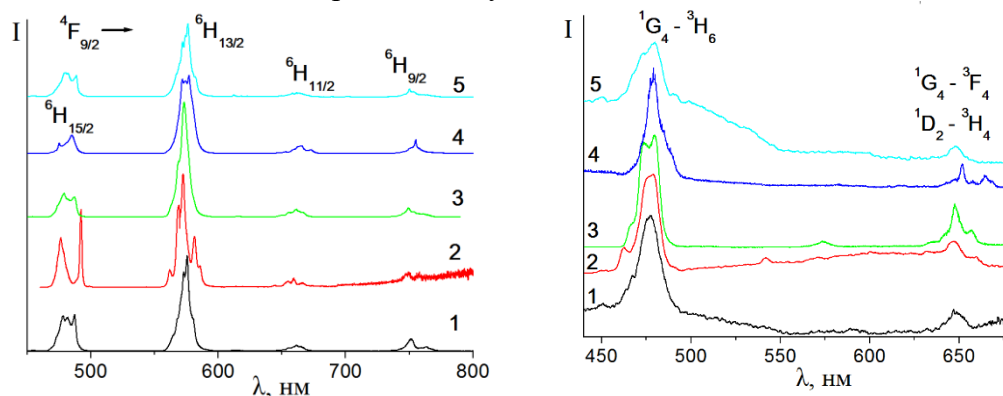


Рис. 1. Спектри люмінесценції одержаних комплексів диспрозію (зліва) та тулію (справа).
1- Cs[LnL¹₄], 2 - NEt₄[LnL¹₄], 3 - PPh₄[LnL²₄], 4 - LnL¹₃TPPO, 5 - LnL¹₃phen.

[1] Priya J., Gondia N.K., Kunti A.K. and Sharma S.K., Pure white light emitting tetrakis β -diketonate dysprosium complexes for OLED applications. ECS J. Solid State Sci. Technol., 2016, 5, R166-R171.

[2] Zang, F.X.; Hong, Z.R.; Li, W.L.; Li, M.T.; Sun, X.Y. 1.4 μ m band electroluminescence from organic light-emitting diodes based on thulium complexes. Appl. Phys. Lett. 2004, 84, 2679–2681.

[3] McAdams S. G., Ariciu A.-M., Kostopoulos A. K., Walsh J. P. S., Tuna F. Molecular single-ion magnets based on lanthanides and actinides: Design considerations and new advances in the context of quantum technologies. Coord. Chem. Rev. 2017, 346, 216–239.

Одержання метил лактату з глюкози з використанням ієрархічних цеолітів Sn-BEA

Курмач М.М.¹, Поляков С.В.^{1,2}, П.С.Яремов¹, О.В. Литюга^{1,3}, О.В. Швець¹, Н.Д. Щербань¹

¹ Інститут фізичної хімії ім. Л.В. Писаржевського НАН України, пр. Науки, 31, 03028 Київ

² ТОВ «Снамін», вул. Вінстона Черчіля, 78, 02094 Київ

³ ТОВ «Фармак», вул. Кирилівська, 63, 04080 Київ

e-mail: mazinator3710@ukr.net

Каталітична конверсія біомаси у молочну кислоту або алкіллактати вважається перспективним методом одержання таких матеріалів завдяки високій швидкості реакції, можливістю масштабування та вищій ефективності. З літератури відомо, що цеоліти з Sn-BEA (які мають переважно кислотні центри Льюїса) здатні каталізувати перетворення вуглеводів у метиллактат в метанолі при 160 °С. Разом з тим, виходи цільових продуктів процесу є відносно низькими (до 50%).

Ієрархічні Sn-вмісні цеоліти структурного типу BEA, що були одержані з використанням Gemini-type поверхнево-активних речовин (ПАР) як структурно-спрямовуючих агентів («прямий» метод) [1] є перспективними каталізаторами даного процесу за рахунок достатньо розвиненої зовнішньої поверхні. Разом з тим, недоліком використання такого методу є його достатньо висока вартість через високу вартість синтезу темплату.

Для вирішення вказаної задачі в даній роботі запропонована альтернативна стратегія, що полягає у використанні бітемплатного методу для синтезу мезопористих (ієрархічних) цеолітів з використанням більш дешевих іоногенних та неіоногенних ПАВ як мезопорогенів та тетраетиламоній гідроксиду як структуро-спрямовуючого агента. Мезопорогени в роботі можна розділити на декілька типів: неіоногенні та катіонні. Як катіонні ПАР використано стеарат натрію та Gemini-ПАР з 2 атомами азоту, в той час як неіоногенні ПАР використано полівініловий спирт (ПВС) та полімери на основі етиленгліколю та пропіленгліколю (поліетиленгліколь (ПЕГ), Pluronic P123®, Pluronic F127®, Triton X-100®, Brij® 56). Окрім того, як потенційні мезопорогени протестовано полімери на основі карбоксиметилцелюлози та гідроксиметилцелюлози.

На основі проведених досліджень показано, що за однакових умов синтезу при близькому мольному співвідношенні Si/мезопороген = 1/30 (мольні співвідношення компонентів в реакційній суміші Si/Sn=75, Si/F=2, F/TEAON = 1,1, Si/H₂O = 7,5) використання полівінілового спирту та поліетиленгліколю дозволяє одержати цеоліти з високими значеннями питомої поверхні (до 300 м²/г) та об'єму мезопор (до 1 см³/г), в той час як додавання до реакційної суміші решти речовин приводило до одержання «мікропористого» цеоліту. Слід відмітити, що на відміну від ієрархічних цеолітів, для яких часто характерне утворення різних за розміром мезопор (діаметром до 20 нм), використання ПВС чи ПЕГ як мезопорогенів приводить до утворення однорідних за розміром мезопор з діаметром 30-40 нм, що можна пояснити в першу чергу більшим розміром молекули використаного полімеру.

Синтезовані матеріали було досліджено у процесі перетворення глюкози у метиллактат. Всі зразки характеризуються достатньо високою конверсією глюкози, що є близькою до 100%, разом з тим, селективність зразків суттєво відрізняється. Зокрема ієрархічні та зразки з розвинутою зовнішньою поверхнею характеризуються високою селективністю по відношенню до метиллактату, в той час як для «неієрархічних» зразків селективність варіюється в межах 30 – 40%

[1] Choi, M.; Na, K.; Kim, J.; Sakamoto, Y.; Terasaki, O.; Ryoo, R., *Nature* 2009, 461 (7261), 246-9

Дослідження властивостей оксосполук у розплаві LiCl при 973 К

Ребров О.Л., Чергинець В.Л., Реброва Т.П., Пономаренко Т.В.

Інститут сцинтиляційних матеріалів Національної академії наук України, пр. Науки, 60,
61072 Харків

e-mail: rebrov_al@nas.gov.ua

За допомогою потенціометричного методу з використанням індикаторного електроду Pt(O₂)/ZrO₂(Y₂O₃) досліджено оксокислотні (кислотність за Луксом – Флудом) властивості розплаву LiCl, визначено розчинність у ньому оксидів MgO і Eu₂O₃ і встановлено особливості перебігу процесу карбохлорування при 973 К.

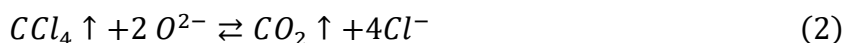
Для оцінки оксокислотних властивостей відносно еталонного розплаву еквімолярної суміші KCl-NaCl використовувався параметр «індекс оксоосновності» (p_{L} [1]), який визначається як різниця показників добутоків розчинності у молярних долях магній оксиду в еталонному ($pK_{\text{sx, MgO, KCl-NaCl}} = 11,62$) і досліджуваному розплавах. Добуток розчинності визначався за допомогою титрування катіонів магнію добавками оксид-іонів:



його значення становить $3,15 \cdot 10^{-5}$ моль²·кг⁻² ($pK_{\text{sx, MgO, LiCl}} = 7,88$), тобто магній оксид є малорозчинним у розплаві LiCl. Індекс оксоосновності $p_{\text{L, LiCl}} = 3,74$, отже розплав LiCl має сильні оксокислотні властивості – сильніші, ніж у розплаву евтектичної суміші KCl-LiCl ($p_{\text{L, KCl-LiCl}} = 3,50$), що спричинено більшим вмістом катіонів літію.

Дослідження розчинності Eu₂O₃ у розплаві LiCl при 973 К проводили методом послідовних добавок, вона дорівнює $5 \cdot 10^{-2}$ моль·кг⁻¹ (або приблизно 1 мас. %).

Процес карбохлорування розплаву LiCl, що містить оксид-іони, триває 60 хвилин, хімічна стадія:



відповідає другому кінетичному порядку і стає лімітуючою після 30 хвилин обробки, константа швидкості реакції (2) дорівнює $3,13 \cdot 10^6$ кг·моль⁻¹·хв⁻¹, а межа очищення розплаву становить $1,9 \cdot 10^{-7}$ моль·кг⁻¹ (O²⁻). Це добре узгоджується з даними для інших хлоридних розплавів, що мають відносно високу кислотність [2].

При карбохлоруванні розплаву, що містить наважку 0,1 г Eu₂O₃, процес розчинення твердої фази займає 100 хв, а загальна тривалість процесу зростає до 4 год. Це пояснюється тим, що після розчинення Європію основною оксосполукою у розплаві стає комплекс EuO⁺, який має істотно вищу спорідненість до оксид-іонів. Фінальна стадія процесу лімітується дисоціацією EuO⁺ з утворенням O²⁻, що відповідає першому кінетичному порядку, константа рівноваги процесу становить $(2,3 \pm 0,001) \cdot 10^{-2}$. Одержане значення є більшим, ніж одержане в роботі [3] – $(5,4 \pm 0,2) \cdot 10^{-3}$ – що пояснюється вищим вмістом рідкісноземельного металу у розплаві 2CsCl-LiCl-YCl₃ (молярна частка YCl₃ – 0,25).

[1] Cherginets, V.L.; Demirskaya, O.V.; Rebrova, T.P. Oxobasicity index as a measure of acidic properties of ionic melts: definition and methods of acidity estimation, Molten salts forum, 2000, 7, pp. 163–166.

[2] Cherginets, V.L.; Rebrova, T.P.; Naumenko, V.A.; Rebrov, A.L.; Yurchenko, O.I.; Regularities of deep deoxidization of molten ionic chlorides in reactive gas atmosphere. RSC Adv., 2016, 6, pp. 58780–58785.

[3] Cherginets, V.L.; Rebrova, T.P.; Ponomarenko, T.V.; Kisil, E.P.; Filippovich, L.I. Oxoacidic properties of melts of CsCl-LiCl-YCl₃ system and features of their purification from oxide ion traces. J. Chem. Eng. Data, 2011, 56(10). pp. 3897–3901.

Синтез матеріалу для водоочистки з комбінованими властивостями на основі вугілля, модифікованого ПГМГ

Дорошук В.В.¹, Безуглий М.Ю.^{1,2}, Алексєєв С.О.¹

¹ Київський національний університет імені Тараса Шевченка, вул. Володимирська, 60, 01033 Київ

² в/ч А5030

e-mail: doroshchuk.v@gmail.com

В умовах масштабних бойових дій суттєвою гуманітарною проблемою є забруднення джерел питної води[1]. Доцільним є застосування портативних та дешевих очисних установок на основі недорогих сорбційних та іонообмінних матеріалів, які б включали також знезараження від біологічних забрудників.

Метою цього дослідження була розробка підходу до синтезу матеріалу на основі активованого вугілля, що поєднуватиме властивості іонообмінника, сорбційну ємність та одночасно чинитиме знезаражувальну дію.

Основою для виготовлення цільового матеріалу стало комерційно-доступне активоване вугілля марки БАУ-А (ДСТУ 6217-74). Полігексаметиленгуанідин гідрохлорид (ПГМГ-ГХ) - катіонна полімерна сполука, відома як антимікробний та антисептичний агент, який може руйнувати клітинну мембрану мікроорганізмів[2]. Сорбцію та стабільне утримання ПГМГ-ГХ на вугіллі забезпечували за рахунок утворення на поверхні карбоксильних груп, за рахунок обробки поверхні розчином нітратної кислоти при нагріванні.

Вихідні та модифіковані зразки матеріалів досліджувались методами ІЧ спектроскопії, скануючої електронної мікроскопії, рентгенофазового аналізу, температурно-програмованої десорбційної мас-спектрометрії. Встановлювались електропровідність, питома площа поверхні та ряд параметрів за методом БЕТ.

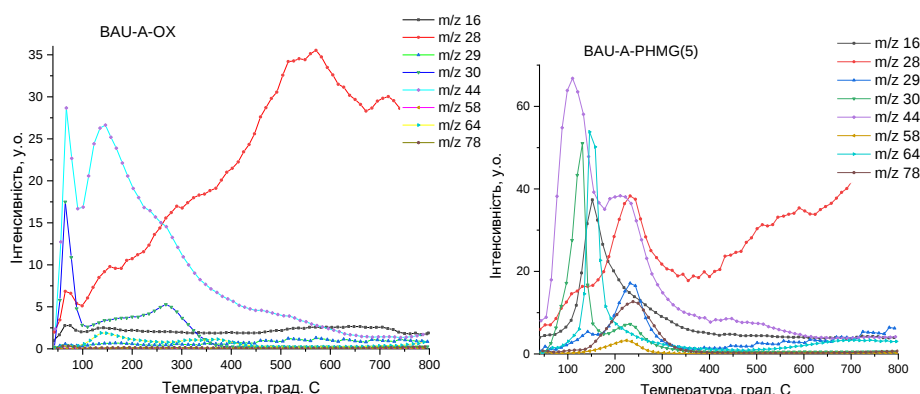


Рис. 1. Іонні профілі ТПД-МС за $m/z = 16$ (NH_4^+), 28 (CO^+), 30 (NO^+), 44 (CO_2^+), 64 (SO_2^+) та 29, 55, 78 (фрагменти органічних молекул) зразків БАУ-А-ОХ(5) та БАУ-А-РНМГ(5).

У результатах дослідження методом ТПД-МС (рис. 1) проявились іони з $m/z = 16$ (NH_4^+), що є наслідком сорбції на поверхню ПГМГ-ГХ.

Таким чином нами досліджено властивості поверхні вихідного матеріалу та запропоновано методику синтезу функціонального матеріалу на основі активованого вугілля, що модифіковане ПГМГ-ГХ. Методика полягає у окисненні поверхні розчином нітратної кислоти та подальшій сорбції ПГМГ-ГХ з водних розчинів. За нею вперше синтезовано новий матеріал, який може застосовуватись для очистки води.

[1] Matviichuk, O.; Hygienic assessment of potential health risks for the population of Ukraine and the Kharkiv region as a result of the deterioration of drinking water supply in the conditions of war. *ScienceRise Medical Science* **2023**, No. 5(56), 16–24. <https://doi.org/10.15587/2519-4798.2023.295104>.

[2] Liu, W.; Zhang, J.; Chen, L. Poly(hexamethylene guanidine): An Effective Compound in Tackling Persistent Bacterial Subpopulations. *Microorganisms* **2025**, 13 (9), 2002. <https://doi.org/10.3390/microorganisms13092002>.

Фізико-хімічна взаємодія в квазіпотрійній системі $\text{Tl}_2\text{Se}-\text{CdSe}-\text{GeSe}_2$

Селезень А.О.¹, Мороз М.В.¹, Козут Ю.М.², Піскач Л.В.²

¹Кафедра хімії та фізики, Національний університет водного господарства та природокористування, вул. Соборна, 11, 33000 Рівне

²Кафедра неорганічної та фізичної хімії, Волинський національний університет імені Лесі Українки, вул. Потапова, 9, 43005 Луцьк
e-mail: a.o.selezen@nuwm.edu.ua

Дослідження квазіпотрійної системи $\text{Tl}_2\text{Se}-\text{CdSe}-\text{GeSe}_2$ зумовлене пошуком нових тетрарних фаз та твердих розчинів для напівпровідникового матеріалознавства. Методами рентгенофазового (РФА), мікроструктурного (МСА) та диференційно-термічного (ДТА) аналізів досліджено взаємодію у квазіпотрійній халькогенідній системі $\text{Tl}_2\text{Se}-\text{CdSe}-\text{GeSe}_2$. Побудовано ізотермічний переріз даної системи при температурі 570 К та сім політермічних перерізів ($\text{Tl}_2\text{Se}-\text{CdSe}$, $\text{Tl}_4\text{GeSe}_4-\text{CdSe}$, $\text{Tl}_2\text{GeSe}_3-\text{CdSe}$, $'\text{Tl}_2\text{CdSe}_2'-\text{GeSe}_2$, $\text{Tl}_2\text{GeSe}_3-\text{Tl}_2\text{CdGe}_3\text{Se}_8$, $\text{Tl}_2\text{CdGe}_3\text{Se}_8-\text{CdSe}$, $\text{Tl}_4\text{GeSe}_4-\text{Tl}_2\text{CdGeSe}_4$). Побудовано проекцію поверхні ліквідусу досліджуваної системи.

В системі $\text{Tl}_2\text{Se}-\text{CdSe}-\text{GeSe}_2$ при температурі 570 К на обмежуючих бічних сторонах існує чотири тернарні сполуки (Tl_4GeSe_4 , Tl_2GeSe_3 , $\text{Tl}_2\text{Ge}_2\text{Se}_5$ та Cd_4GeSe_6). Додатково у досліджуваній системі утворюються дві тетрарні сполуки $\text{Tl}_2\text{CdGeSe}_4$ та $\text{Tl}_2\text{CdGe}_3\text{Se}_8$. При температурі 570 К в стані термодинамічної рівноваги перебувають дев'ять однофазних (α -, β -, γ -, ε -, δ -, η -, ξ -, σ та θ -полів на основі сполук Tl_2Se , CdSe , GeSe_2 , Tl_4GeSe_4 , Tl_2GeSe_3 , $\text{Tl}_2\text{Ge}_2\text{Se}_5$, Cd_4GeSe_6 , $\text{HTM}-\text{Tl}_2\text{CdGeSe}_4$ та $\text{Tl}_2\text{CdGe}_3\text{Se}_8$ відповідно), сімнадцять двофазних ($\alpha+\beta$, $\alpha+\delta$, $\delta+\varepsilon$, $\varepsilon+\eta$, $\eta+\gamma$, $\gamma+\xi$, $\xi+\beta$, $\delta+\beta$, $\delta+\sigma$, $\varepsilon+\sigma$, $\sigma+\beta$, $\varepsilon+\theta$, $\theta+\sigma$, $\theta+\beta$, $\eta+\theta$, $\theta+\xi$, $\gamma+\theta$) і дев'ять трифазних полів ($\alpha-\beta-\delta$, $\delta-\beta-\sigma$, $\delta-\varepsilon-\sigma$, $\varepsilon-\sigma-\theta$, $\varepsilon-\eta-\theta$, $\eta-\theta-\gamma$, $\beta-\sigma-\theta$, $\beta-\theta-\xi$, $\xi-\theta-\gamma$).

Перерізи $\text{Tl}_2\text{Se}-\text{CdSe}$ (нонваріантний процес $L \leftrightarrow \alpha+\beta$), $\text{Tl}_4\text{GeSe}_4-\text{CdSe}$ ($L \leftrightarrow \delta+\beta$), $\text{Tl}_2\text{CdGe}_3\text{Se}_8-\text{CdSe}$ ($L \leftrightarrow \theta+\beta$) належать до евтектичного типу. На перерізі $\text{Tl}_2\text{GeSe}_3-\text{CdSe}$ при співвідношенні компонентів 1:1 при температурі 809 К та мольному складі 21 мол.% CdSe за перитектичною реакцією $L+\beta \leftrightarrow \text{BTM}-\text{Tl}_2\text{CdGeSe}_4$ (σ) інконгруентно утворюється тетрарна сполука $\text{Tl}_2\text{CdGeSe}_4$. Для неї характерний фазовий перехід при температурі 683 К. Ці чотири із семи досліджених політермічних перерізів є квазібінарними системами у всьому температурному та концентраційному інтервалах. Низькотемпературна модифікація тетрарної сполуки $\text{Tl}_2\text{CdGeSe}_4$ (σ) кристалізується в тетрагональній структурі у $III I-42m$ (СТ $\text{Tl}_2\text{CdGeSe}_4$ [1]) з параметрами ґратки: $a=0.80145(9)$, $c=0.67234(9)$ нм. Інша тетрарна сполука $\text{Tl}_2\text{CdGe}_3\text{Se}_8$ кристалізується у $III I-42m$ у структурному типі $\text{Cs}_2\text{CdGe}_3\text{Se}_8$ [2] з параметрами ґратки: $a=0.76033(9)$, $b=1.2072(2)$, $c=1.7475(2)$ нм.

Побудова політермічних перерізів є важливою складовою для встановлення температурних та концентраційних координат у досліджуваній квазіпотрійній системі.

[1] MqGuire, M. A., Scheidemantel, T. J., Badding, J. V., DiSalvo, F. J. Tl_2AXTe_4 ($A = \text{Cd}, \text{Hg}, \text{Mn}$; $X = \text{Ge}, \text{Sn}$): Crystal Structure and Thermoelectric Properties. *Chem. Mater.* 2005, 17, pp 6186–6191.

[2] $\text{Cs}_2\text{CdGe}_3\text{Se}_8$ Morris, C. D.; Li, H.; Jin, H.; Malliakas, C. D.; Peters, J. A.; Trikalitis, P. N.; Kanatzidis, M. G. $\text{Cs}_2\text{M}^{\text{II}}\text{M}^{\text{IV}}_3\text{Q}_8$ ($Q = \text{S}, \text{Se}, \text{Te}$): An Extensive Family of Layered Semiconductors with Diverse Band Gaps. *Chem. Mater.* 2013, 25, 3344–3356.
<http://dx.doi.org/10.1021/cm401817r>

Вплив умов формування MoS₂ на каталітичні властивості в реакціях гідрування хіноліну та його галогенпохідних

Теребіленко А. В.^{1,2}, Котенко І. С.¹, Колотілов С. В.¹

¹Інститут фізичної хімії ім. Л. В. Писаржевського НАН України, пр. Науки 31, 03028 Київ

²ТОВ «Науково-Виробниче Підприємство «Єнамін», вул. А. Матросова 23, 01103 Київ

e-mail: veritas197@ukr.net

Реакції каталітичного гідрування карбо- та гетероциклів є важливим препаративним інструментом для отримання діючих речовин для фармацевтики. В таких процесах найбільш широкоживаними каталізаторами є системи на основі металів платинової групи (Pd, Pt, Ru тощо), оскільки вони мають високу активність. Однак, використання таких каталізаторів обмежене високою вартістю, потенційною токсичністю, а іноді - чутливістю до домішок в реакційній суміші. Висока активність каталізаторів на основі металів платинової групи може знижувати селективність реакцій, зокрема при гідруванні галогенвмісних сполук часто спостерігається де галогенування [1]. Означені недоліки зумовлюють зростаючий інтерес до розробки альтернативних каталітичних систем на основі доступніших перехідних металів.

В даній роботі досліджено вплив умов формування на фазовий склад, морфологію та каталітичні властивості MoS₂ в реакціях гідрування хіноліну та його галогенпохідних. Гідротермальним методом з варіюванням температури та кількості сірковмісного прекурсору одержано серії зразків MoS₂. З використанням методів СЕМ та ТЕМ досліджено вплив температури одержання MoS₂ на його морфологію. Показано, що в температурному діапазоні 135 – 180 °С тонкі листочки-пелюстки MoS₂ утворюють кулясті конгломерати – «наноквіти», середній діаметр яких монотонно збільшується (від 50 до 850 нм) з підвищенням температури синтезу. Методами РФА, раманівської та рентгенівської фотоелектронної спектроскопії встановлено присутність різних поліморфних форм MoS₂: метастабільної (1T) і гексагональної (2H) фаз [2].

Каталітичні властивості MoS₂ досліджували в реакції гідрування хіноліну в метанолі (T = 100°C, p(H₂) = 100 атм., 24 год., 10 мольних % MoS₂). Найвищий вихід 1,2,3,4-тетрагідрохіноліну (67 – 75 %) досягнуто для зразків MoS₂, одержаних з надлишком сірковмісного прекурсору при температурах 130-150 °С. У випадку гідрування галогенвмісних похідних хіноліну за аналогічних умов (час реакції – 48 год.) найбільші виходи галогенвмісних продуктів було виявлено для зразків, отриманих при 130, 135 та 140 °С без надлишку сірковмісного прекурсору. Селективність реакції залежить від положення замісника в хіноліновому ядрі. Так, гідрування 5-, 7- та 8-бромхіноліну призводило до одержання 96 – 100 % відповідного продукту (5-, 7- та 8-бром-1,2,3,4-тетрагідрохіноліну), тоді як у випадку 6-бромхіноліну вихід продукту не перевищував 25 %. Гідрування хлорпохідних хіноліну призвело до одержання бажаного галогенвмісного продукту з виходом від 51 до 90 % зі значеннями селективності реакції до 100 %.

Таким чином, описані каталізатори можуть бути запропоновані для селективного гідрування хіноліну та його галогеновмісних похідних у лабораторних умовах.

[1] Ivanytsya, M. O.; Subotin, V. V.; Gavrilenko, K. S.; Ryabukhin, S. V.; Volochnyuk, D. M.; Kolotilov, S. V. *Chem. Rec.* **2023**, e202300300.

[2] Terebilenko, A. V.; Olenchuk, M. V.; Mazur, D. O.; Nikolenko, A. S.; Popenko, V. I.; Dovbeshko, G. I.; Bezkravnyi, O.; Sabov, T.; Romanyuk, B. M.; Poroshin, V. N.; Ryabukhin, S. V.; Volochnyuk, D. M.; Kolotilov, S. V. *Dalton Trans.*, **2025**, 54, 13057–13070.

Будова та спектрально-люмінесцентні властивості β,γ -піридиноїлгідразонів і їх комплексів з РЗЕ: експериментальне дослідження та квантово-хімічне моделювання

Галущенко В.С.^{1,2}, Коровін О.Ю.¹

¹ Фізико-хімічний інститут ім. О.В. Богатського НАН України, Люстдорфська дорога, 86, 65080 Одеса

² Факультет хімії та фармації, Одеський національний університет імені І.І. Мечникова, вул. Всеволода Змієнка, 2, 65000 Одеса
e-mail: valeriia.halushchenko@gmail.com

Гідразони становлять перспективний клас органічних сполук завдяки простому синтезу, структурній різноманітності та широкому спектру практичного застосування. Структурний фрагмент ($-\text{CO}-\text{NH}-\text{N}=\text{CH}-$), що поєднує іміно- та амідну функціональність, зумовлює наявність донорно-акцепторних центрів, здатних до множинних міжмолекулярних взаємодій. Це визначає прикладний потенціал гідразонів, а також їх застосування у якості молекулярних сенсорів, нелінійно-оптичних матеріалів, фотонних елементів та функціональних компонентів молекулярної електроніки. Особливу увагу привертає явище таутомерії гідразонів, яке забезпечує можливість існування кількох стабільних форм з відмінними електронними та спектральними характеристиками. Це відкриває перспективи використання таких сполук як молекулярних перемикачів і прототипів молекулярних машин. З іншого боку, комплексоутворення гідразонів із рідкісноземельними іонами надає сполукам додаткових фотофізичних властивостей, зокрема люмінесценції в ближній ІЧ-області, що є актуальним для фотоніки, біосенсорики та оптоелектроніки. У сучасній науці дедалі більшого значення набуває поєднання експериментальних методів спектроскопії з квантово-хімічним моделюванням (DFT, TDDFT). Такі розрахунки дозволяють із високою точністю прогнозувати геометрію, електронні стани та фотофізичні параметри молекул, що істотно доповнює й поглиблює експериментальні результати.

Метою даної роботи було встановлення будови, таутомерної рівноваги та спектрально-люмінесцентних властивостей піридиноїлгідразонів 1-гідроксинафталдегіду та їх комплексів з іонами рідкісноземельних елементів із застосуванням експериментальних і теоретичних методів. Досліджено молекулярну будову (E)-N'-((3-гідроксинафталін-2-іл)метил)нікотино- (H2Nnf) та ізонікотиногідразиду (H2Inf) із залученням методів ІЧ-спектроскопії, мас-спектрометрії, рентгеноструктурного аналізу. Оптимізацію геометрії досліджених систем здійснено із застосуванням гібридних функціоналів B3LYP та wB97X-3C у поєднанні з базисними наборами def2-TZVP та def2/J. Розрахунки виконувалися за допомогою пакета програм Orca 6.1 [1]. Проведено порівняння експериментальних та розрахункових ІЧ- та УФ-спектрів.

Отримано комплекси РЗЕ (Y, La, Nd, Er, Yb, Lu) складу 1:2, які було проаналізовано методами ІЧ-спектроскопії. На підставі отриманих даних запропоновано схематичну будову синтезованих сполук. За допомогою комплексу програм Lumrac 2.0 [2] проведено моделювання спектрів поглинання, які добре співпали з експериментальними даними, а також збуджених станів. Досліджено та проаналізовано спектрально-люмінесцентні характеристики комплексів та встановлено що β,γ -піридиноїлгідразони виступають сенсibilізаторами 4f-люмінесценції у ближній ІЧ-області. Спостерігається інтенсивна люмінесценція в області 950-1100 нм ($[\text{Yb}(\text{HL})_2(\text{NO}_3)(\text{Solv})]$), 850-1400 нм ($[\text{Nd}(\text{HL})_2(\text{NO}_3)(\text{Solv})]$), 1450-1550 нм ($[\text{Er}(\text{HL})_2(\text{NO}_3)(\text{Solv})]$).

[1] Neese, F. Software update: the ORCA program system, version 6.0. WIREs Comput. Molec. Sci., 2025, 15(1), e70019.

[2] Dutra, J.D.L., Oliveira, W.F., Silva G.S., Bispo T.D., Freire R.O. LUMPAC 2.0—Bridging Theory and Experiment in the Study of Luminescent Systems. J. Comput. Chem., 2025, 46(17), e70143.

Вплив сольватації на колоїдну стабільність одностінних вуглецевих нанотрубок

В. І. Гайдар

¹ Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна, майдан Свободи, 4, 61022
Харківe-mail: xa11800239@student.karazin.ua

Дане дослідження присвячене вивченню впливу сольватації на колоїдну стабільність одностінних вуглецевих нанотрубок (SWCNT), модифікованих карбоксильними групами, у концентрованих водно-органічних середовищах. Як органічні компоненти були використані метанол, ацетонітрил та диметилсульфоксид у високих концентраціях (95 об. %). Ключовою метою роботи було виявлення ролі сольватації немодифікованої поверхні SWCNT у стабілізуючому механізмі.

Для оцінки впливу екранування заряду на коагуляцію, окрім звичайних неорганічних електролітів (NaCl, NaClO₄, BaCl₂), використано хлорид тетрафенілфосфонію (TPPC), катіон якого мінімізує ефект специфічної адсорбції. Усі досліді проводили з однієї вихідної водної суспензії SWCNT для гарантії ідентичності дисперсних частин.

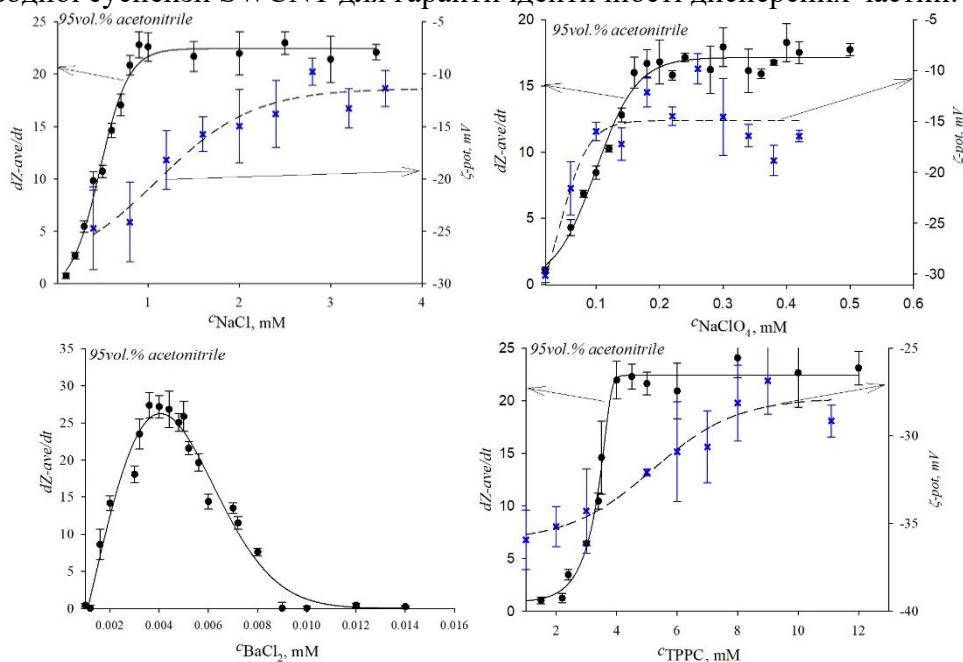


Рис. 1 Залежності швидкості коагуляції та електрокінетичного потенціалу колоїдних частинок SWCNT у 95 об.% ацетонітрилі від концентрації хлориду натрію, перхлорату натрію, хлориду барію та хлориду тетрафенілфосфонію.

Встановлено, що критичні концентрації коагуляції для неорганічних електролітів у 95% ацетонітрилі на два порядки нижчі, ніж у воді, тоді як у ДМСО значення ККК залишаються відносно близькими до водних. Це пояснюється поганою сольватацією вуглецевих нанотрубок катіонофобним ацетонітрилом у порівнянні з водою та катіонофільним ДМСО. Використання тетрафенілфосфонію хлориду підтвердило основну ідею про роль сольватації у стабільності SWCNT. Незважаючи на можливу зміну механізму взаємодії, значення ККК зменшуються в послідовності: ДМСО > вода > ацетонітрил $\approx$ метанол.

Отримані результати дозволяють кількісно оцінити внесок сольватації в енергію взаємодії частинок у рамках теорії ДЛФО та свідчать про те, що для дисперсій окиснених SWCNT окрім електростатичного відштовхування слід враховувати фактор гідратаційної стабілізації. Результати дослідження мають важливе значення для застосування вуглецевих нанотрубок у рідинних середовищах різної природи.

Область існування та структурна характеристика твердого розчину з моноклінною структурою у псевдопотрійній системі $\text{Ga}_2\text{O}_3\text{--Al}_2\text{O}_3\text{--In}_2\text{O}_3$

Гірський Ю. В., Стадник В. Є., Греб В. М.
Кафедра напівпровідникової електроніки,
Національний університет «Львівська політехніка»,
вул. Степана Бандери, 12, 79013 Львів
e-mail: yurii.v.hirskyi@lpnu.ua

Оксид галію (Ga_2O_3) є перспективним надширокозонним напівпровідником для силової електроніки та УФ оптоелектроніки. Модифікація його властивостей шляхом утворення твердих розчинів є ключовим завданням матеріалознавства. Сучасний підхід, що базується на концепції середньоентропійних оксидів, передбачає одночасне змішування трьох типів катіонів (Ga^{3+} , Al^{3+} , In^{3+}) для стабілізації однофазної структури в ширшому концентраційному діапазоні та гнучкого керування параметрами матеріалу. Метою даної роботи є дослідження меж існування твердого розчину з моноклінною структурою типу $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ у псевдопотрійній системі $\text{Ga}_2\text{O}_3\text{--Al}_2\text{O}_3\text{--In}_2\text{O}_3$ та встановлення закономірностей зміни його структурних параметрів.

Серії зразків змішаних оксидів $(\text{Ga}_{1-x-y}\text{Al}_x\text{In}_y)_2\text{O}_3$ різного складу були синтезовані комбінованими методом золь-гель спалювання розчину з подальшим двостадійним високотемпературним відпалом на повітрі при 1473 К (4 год) та 1773 К (5 год) для досягнення рівноважного стану. Фазовий склад та кристалічну структуру матеріалів досліджували методом рентгенівської порошкової дифракції з подальшим повнопрофільним аналізом за методом Рітвельда. Було синтезовано та проаналізовано понад двадцять зразків, що дозволило визначити межі області гомогенності моноклінної фази. Встановлено, що в серії з компенсаційним заміщенням $(\text{Ga}_{1-z}\text{Al}_{0.69-z}\text{In}_{0.31-z})_2\text{O}_3$, де середній радіус катіонів залишається незмінним, однофазна моноклінна структура зберігається до максимального сумарного заміщення $z=0.4$. При вищих концентраціях ($z \geq 0.45$) спостерігається утворення раніше невідомої вторинної фази. Для концентраційної серії $(\text{Ga}_{0.6}\text{Al}_{0.4-y}\text{In}_y)_2\text{O}_3$ виявлено виражену анізотропію розширення кристалічної ґратки: із збільшенням вмісту індію при сталому вмісті галію параметри a і b зростають значно інтенсивніше, ніж параметр c , що свідчить про переважне розширення структури в певних кристалографічних напрямках. На основі отриманих даних були виведені емпіричні залежності, що пов'язують параметри ґратки подвійно заміщеного твердого розчину на основі $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ з його хімічним складом.

Таким чином, у даному дослідженні визначено точну межу розчинності для твердих розчинів $(\text{Ga,Al,In})_2\text{O}_3$ з моноклінною структурою та виявлено утворення нової кристалічної фази за межами цієї області. Результати демонструють можливість цілеспрямованого та анізотропного керування структурними параметрами оксиду галію шляхом комплексного катіонного заміщення, що відкриває шлях до створення матеріалів із заданими властивостями.

Роботу було підтримано Міністерством освіти і науки України в рамках проєкту №0125U001768 (ДБ/ГАЛІО) «Розробка принципів формування властивостей надширокозонних напівпровідників на основі Ga_2O_3 для силової електроніки та УФ-оптоелектроніки».

Метод окиснення похідних фентіазину до сульфоксидів

¹Криськів Л.С., ¹Кучер Т.В., ²Криськів О.С., ²Мороз В.П., ²Блажеєвський М.Є.

¹Тернопільський національний медичний університет ім. І. Я. Горбачевського МОЗ України, вул. Руська, 36, 46001 Тернопіль

²Національний фармацевтичний університет МОЗ України

вул. Григорія Сковороди, 53, 61002 Харків

e-mail: oleg.kryskiw@gmail.com

На прикладі Етацизину гідрохлориду (2-карбетоксіаміно-10-(3-діетиламінопропіоніл)-фентіазину гідрохлорид) наведені результати вивчення можливості добування сульфоксидів похідних фентіазину за допомогою комерційно доступного Оксону®. Активним інгредієнтом Оксону® є калій пероксомоносульфат (KHSO₅, калій кароат; CAS 10058-23-8), який є компонентом високостабільної потрійної солі 2KHSO₅·KHSO₄·K₂SO₄ (калій гідрогенпероксомоносульфат сульфат (5:3:2:2); CAS 70693-62-8; молярна маса 614,8 г/моль). Оксон® добре та легко розчиняється у воді (при 20 °C розчинність становить >250 г/л). Крім того, цей процес вважається «зеленим» окисненням, оскільки він не чинить токсичної дії.

Наважку 0,05 г Етацизину гідрохлориду розчиняють у 100 мл 0,1 М хлоридної кислоти (при нагріванні на водяному огрівнику при +50 °C), охолоджують до кімнатної температури, а відтак додають 0,05 г Оксону при неперервному перемішуванні. Через 5 хв цей розчин підлучують розчином натрій гідроксиду (10 %-ний) до pH 10 (за індикаторним папірцем) і одразу кілька разів екстрагують хлороформом. Об'єднані хлороформні екстракти фільтрують, випаровують, а залишок зважують. Додають етерний розчин гідроген хлориду та фільтрують осад гідрохлориду. Його розтирають із сухим діетиловим етером. Вихід становить 90 %; температура топлення 177-178 °C. ІЧ-спектр ($\nu_{\max}$, см⁻¹): 3290 (NH), 1730 (C=O уретан), 1690 (C=O амід) та 1040 (S=O). УФ-спектр (pH 2): ϵ ($\lambda_{\max}$ = 279 нм) = 13,699 л моль⁻¹ см⁻¹. Знайдено, %: С 7,47, N 9,16 та S 7,08. C₂₂H₂₇N₃O₄S·HCl. Розраховано, %: С 7,38, N 8,76 та S 6,86. Процедура ідентифікації сульфоксиду за допомогою ТЛХ, а також вибір хромогенного реагенту для виявлення зон адсорбції були детально описані нами раніше [1].

Хроматографічну поведінку S-оксиду Етацизину у порівнянні до Етацизину оцінювали за допомогою рухомих фаз, рекомендованих ТІАФТ, та тих, що перелічені в літературі. Як рухомі фази використовували такі системи розчинників: 1) етилацетат-метанол-25 % розчин амоніаку (85:10:5); 2) ацетонітрил – 25 % розчин амоніаку (45:5); 3) етанол-хлороформ – діетиламін (5:45:1); 4) хлороформ-етилацетат-метанол (60:30:10). Результати ідентифікації продуктів S-окиснення наведені у табл.

Табл. Результати ідентифікації продукту S-окиснення Етацизину

Номер системи	Значення R _f досліджуваної речовини	
	Етацизин	Етацизин сульфоксид
1	0,80±0,01	0,78±0,01
2	0,75±0,01	0,65±0,01
3	0,87±0,01	0,75±0,01
4	0,31±0,01	0,20±0,01
5	0,69±0,01	0,30±0,01

[1] Kryskiw L., Kucher T., Blazheyevskiy M., Moroz V. Study of the chromatographic behavior of ethacizine and its metabolites using thin layer chromatography. Collection of Scientific Papers with the Proceedings of the 3rd International Scientific and Practical Conference «Modern Scientific Research: Theoretical and Practical Aspects» (August 25-27, 2025, Riga, Latvia). European Open Science Space, 2025. P. 159-162. (213 p.) ISBN 979-8-89704-963-9 (series) DOI 10.70286/EOSS-25.08.2025.

Конформаційний аналіз як ключовий інструмент у комп'ютерному дизайні ліків

Гах М.А., Кленіна О.В.

ДНК «Львівський національний медичний університет імені Данила Галицького», вул.

Пекарська, 69, 79010 Львів

e-mail: gahadriana54@gmail.com

Раціональний дизайн ліків є цілеспрямованим процесом, який починається з ідентифікації біологічної мішені та подальший пошук малих лікоподібних молекул, що можуть модулювати їхню функцію для досягнення терапевтичного ефекту. Крім того, необхідно ідентифікувати малі молекули, які демонструють ефективні фармакокінетичні властивості та низьку токсичність. Таким чином, для ефективності методи комп'ютерного дизайну ліків (Computer-aided drug design, CADD), що включають як лігандні, так і структурні методи, повинні бути точними при маніпулюванні структурними даними, оскільки знання структур макромолекул та лігандів, а також зв'язаних та незв'язаних конформацій є передумовою життєво важливого значення для застосування методів 3D-обчислювального молекулярного моделювання. Метою цієї роботи було проаналізувати, систематизувати та узагальнити останні літературні дані, що обговорюють конформаційні ансамблі малих органічних молекул, основні підходи та методи, що застосовуються для їх генерації, та значення конформаційного аналізу лікоподібних молекул у сучасному комп'ютерному дизайні ліків. Органічні молекули можуть існувати у вигляді ансамблю конформацій залежно від кількості вільнообертаючих зв'язків, кутової та торсійної гнучкості, а також конформаційної жорсткості їхніх циклічних систем. Структурні дані, отримані з Банку даних про білки (Protein Data bank, PDB), показали, що один і той самий ліганд, присутній принаймні у двох різних структурах білок-ліганд, може бути знайдений у декількох конформаціях, які суттєво відрізняються ($\text{RMSD} > 2 \text{ \AA}$) [1]. Це означає, що мала молекула повинна прийняти біоактивну конформацію, тобто конформацію, яка може бути розпізнана рецептором і викликати біологічну відповідь.

Пошук біоактивних конформацій для гнучких малих органічних молекул є складною та комплексною проблемою в сучасному дизайні ліків через велику кількість ступенів свободи навіть для відносно малих лігандів, необхідність врахування нековалентних взаємодій, зокрема із врахуванням утворення внутрішньомолекулярних водневих зв'язків та гідрофобних контактів, стеричні перешкоди та властивості циклічних структур, а також вплив зовнішнього середовища, а саме природу розчинника та утворені взаємодії у комплексі ліганд-протеїн, які можуть стабілізувати конформації, які в іншому випадку демонстрували б високу енергію деформації. Наявні на даний момент методи генерації біоактивних конформаційних ансамблів молекул лігандів можна класифікувати як теоретичні або емпіричні [2]. Перша група методів включає розрахунки силового поля та квантово-механічні розрахунки, а друга зазвичай спирається на експериментальні дані про кристалічні структури, що містяться в публічних структурних базах даних, і може генерувати велику кількість конформерів, використовуючи попередньо створену бібліотеку фрагментів та базу знань з відносно невеликими обчислювальними витратами. У емпіричному підході відповідне силове поле застосовують для уточнення структури отриманих конформерів. 3].

[1] Klingler, J. Influence of Pretreatment on Sodium Powder. Chem. Mater. 2005, 17 (8), pp 2755–2768.

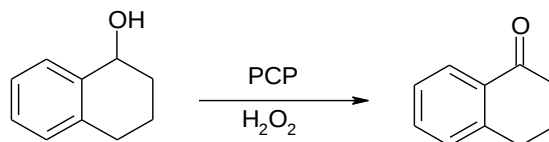
[1] Hawkins, P. C. Conformation generation: the state of the art. J. Chem. Inf. Model. 2017, 57 (8) - pp 1747-1756.

[2] Taylor, R., Knowledge-based libraries for predicting the geometric preferences of druglike molecules. J. Chem. Inf. Model. Vol. 54, № 9. – pp 2500-2514. [3] Zivanovic, S., Bioactive conformational ensemble server and database. A public framework to speed up in Silico drug discovery J. Chem. Theory and Computation. Vol. 16, № 10. – pp. 6586-6597.

Каталітична активність пористих координаційних полімерів Cu(II) та Fe(III) при окисленні 1,2,3,4-тетрагідро-1-нафтолу перекисом водню*Абдуллаєв Е. Н.¹, Іваниця М. О.^{1,2}, Мішура А. М.¹, Гавріленко К. С.^{2,3}, Колотілов С. В.¹*¹ Інститут фізичної хімії ім. Л.В.Писаржевського НАН України, просп. Науки, 31, Київ, 03028, Україна² Enamine Ltd, Вулиця Вінстона Черчилля, 67, 02094, Україна, Київ³ Київський Національний Університет імені Тараса Шевченка, Вулиця Володимирська, 60, 01033, Київ, Українаe-mail: abdullaev.emir99@gmail.com

Пористі координаційні полімери (ПКП) 3d-металів розглядаються як перспективні каталізатори окислювальних реакцій тонкого органічного синтезу. Використання таких каталізаторів дозволяє проводити реакції в умовах гетерогенного каталізу (включаючи використання проточних реакторів), що спрощує відділення каталізатора і очищення продукту. Визначення факторів, що впливають на каталітичну активність таких систем, є важливим завданням сучасної фізичної хімії та каталізу

Метою даної роботи було оцінити і порівняти каталітичну активність PCP Cu₃(btc)₂ (відома як HKUST-1; btc³⁻ 1,3,5-бензентрикарбоксилат) і Fe₂(OH)₃(btc) в реакції 1,2,3,4-тетрагідро-1-нафтол окислення перекисом водню, що призводить до α-тетралону (фіг. 1).



Фіг. 1. Схема вивченої реакції.

PCPs Cu₃(btc)₂ і Fe₂(OH)₃(btc) синтезували шляхом електрохімічного розчинення металевих Cu або Fe анодів, відповідно, в розчинах, що містять H₃btc. Реакції окислення проводили перемішуванням розчинів, що містять реагенти і суспендований каталізатор, при 25 °C протягом 24 годин. Перекис водню відбирали в надлишку, ацетонитрил використовували в якості розчинника. Продукти аналізували за допомогою ¹H NMR and HPLC.

Було виявлено, що Fe₂(OH)₃(btc) був значно більш активним порівняно з Cu₃(btc)₂; у аналогічних умовах вихід α-тетралона був значно вищим у випадку Fe₂(OH)₃(btc). Однак при високому навантаженні Fe₂(OH)₃(btc) окислення не припинялося на утворення α-тетралону, а призводило до суміші продуктів, що виникають в результаті розщеплення вуглеводневої ланцюга. У разі Cu₃(btc)₂ чистий α-тетралон може бути виділений разом з непрореагировавшим 1,2,3,4-тетрагідро-1-нафтолом.

Для виконання процесу в потоковому режимі композит Cu₃(btc)₂ і аеросилу готували шляхом осадження мікрочастинок Cu₃(btc)₂ на аеросил (дисперсний SiO₂) під дією ультразвуку в суспензії. Встановлено, що об'єм мікропор композиту зменшується порівняно з чистим Cu₃(btc)₂ пропорційно його вмісту. Проходження реакційної суміші через 2 см шару композиту призвело до значного збільшення конверсії порівняно з реакцією періодичної дії. Наприклад, вихід α-тетралона після проходження через колонку становив 33% протягом 2 годин, тоді як аналогічний вихід у партії досягався через 24 годин реакції при аналогічних концентраціях реагентів.

Вплив складу і будови кобальтвмісних каталізаторів на їх продуктивність в процесі гідрування хіноліну

Арабаджі М. І.^{1,2}, Пашкевич В. П.^{1,2}, Суботін В. В.^{1,2}, Остапчук Є. М.¹, Парійська О. О.², Курмач М. М.², Мельниченко О. В.³, Колотілов С. В.²

¹ТОВ НВП "Снамін", Україна, 02094, Київ, вул. Черчилля Вінстона 78; ²Інститут фізичної хімії ім. Л.В.Писаржевського НАНУ, Україна, Київ, просп. Науки 31; ³ДП "Радма" Інституту фізичної хімії ім. Л.В.Писаржевського НАНУ, Україна, Київ, просп. Науки 31

e-mail: kolkamessi3@gmail.com

Розробка нових каталізаторів гідрування органічних сполук, що не містять платинових металів, є актуальною задачею сучасної органічної та фізичної хімії. Перспективним є використання композитів, що містять наночастинки кобальту і графеноподібні вуглецеві наночастинки, як каталізаторів гідрування органічних сполук, оскільки такі системи мають вищу активність порівняно з аналогами, що містять лише кобальт. У той же час, роль кожної компоненти в таких системах остаточно не зрозуміла. Мета роботи полягає у з'ясуванні ролі графеноподібної вуглецевої складової та хімічного складу кобальтвмісних наночастинок у визначенні каталітичних властивостей композитів на основі Со в процесах гідрування органічних сполук. Для досягнення цієї мети в роботі досліджено каталітичні властивості композитів, що містять вуглецеві складові різної дефектності (дефектність змінено під дією опромінення швидкими електронами), а також аналогів, що не містять такої складової взагалі.

Шляхом піролізу координаційної сполуки Со(II) з 1,2-діамінобензолом, нанесеної на аеросил А300, одержано композит, що містять частинки кобальту і вуглецевмісні частинки. За даними спектроскопії Рамана встановлено, що структура графеноподібного вуглецю після опромінення швидкими електронами (енергія 2,3 МеВ) стає більш впорядкованою, що пояснюється відновленням оксиду графену за участю води повітря. Впорядкування оксиду графену також спостерігається і у випадку опромінення його плівок, що не містять металу, на склі.

Шляхом відновлення СоCl₂ борогідридом натрію у присутності відповідних носіїв одержано композити кобальту (у суміші з боридом кобальту) на вугіллі (Норіт) та на аеросилі (А300), які не містять вуглецевої складової.

Композити, отримані шляхом піролізу координаційної сполуки Со(II) з 1,2-діамінобензолом, з подальшим опроміненням, а також відновленням СоCl₂ борогідридом натрію, були використані як каталізatori гідрування воднем ряду органічних сполук із різними функціональними групами, таких як хіноліни, ізохіноліни, галогенвмісні хіноліни, піридини, алкени, алкіни, кетони, нітрили, оксими тощо (Н = 100 атм, Т = 100°C в метанолі). В цілому каталізatori на основі кобальту, що не містили графеноподібної вуглецевої складової, були менш ефективними, ніж аналоги, що додатково мали вуглецеві частинки. Опромінення зразків композитів призводило до збільшення виходу продуктів гідрування в 17 випадках з 26, що може бути ознакою участі графеноподібних вуглецевих частинок у формуванні каталітично активних центрів. Неочікувано, у випадку галогенвмісних хінолінів були отримані відповідні F, Cl, Br-тетрагідрохіноліни із виходами 85-99%, а у випадку йодхіноліну був отриманий відповідний N-метилйодтетрагідрохінолін із виходом 30%.

Кисотно-основні, спектрофотометричні та сольватохромні властивості деяких катіонних барвників – похідних 1,3,3-триметиліндолю

Вірченко М.О., Міллер В.Ю., Барладян Д.В., Жуковецька О.М., Снігур Д.В.

Одеський національний університет імені І.І. Мечникова,

вул. Всеволода Змієнка, 2, 65082 Одеса

e-mail: snigur@onu.edu.ua

В практиці хімічного аналізу широко застосовуються реакції утворення іонних асоціатів (ІА). Зокрема для визначення вмісту іонів золота, срібла та платинових металів використовують їх здатність до утворення аніонних ацидокомплексів та відповідних ІА з катіонними барвниками. Цікавими представниками катіонних барвників є похідні 1,3,3-триметиліндолю, які є інтенсивно забарвленими сполуками, є стійкими до дії кислот та лугів, а їх однозарядна катіонна форма існує в широкому інтервалі рН, що робить ІА на їх основі ефективними аналітичними формами для спектрофотометричного аналізу. Проте дані щодо кислотно-основних, спектрофотометричних та сольватохромних властивостей катіонних барвників похідних 1,3,3-триметиліндолю розрізнені.

Таким чином, мета даної роботи полягає у дослідженні кислотно-основних, спектрофотометричних та сольватохромних властивостей ряду барвників: катіонного рожевого 2С, катіонного червоного GRH, катіонного коричневого, катіонного червоного 4G, катіонного червоного 5G, катіонного темно-синього 2К та катіонного оранжевого Ж.

Кисотно-основні властивості перерахованих барвників у водних розчинах вивчали методами спектрофотометрії та кольориметрії. Для визначення рК зареєстровано спектри світлопоглинання водних розчинів катіонних барвників при варіюванні кислотності середовища у діапазоні від 4М H_2SO_4 до рН 14 та розраховано зміну кольориметричної функції питомої відмінності кольору. Залежність останньої від кислотності середовища характеризується наявністю двох максимумів, що вказує на існування у розчині трьох кислотно-основних форм, які знаходяться у динамічній рівновазі в залежності від рН.

Величини рК, які встановлені різними методами, близькі між собою, що свідчить про їх правильність. Зазначимо, що досліджені катіонні барвники зазнають кислотно-основних перетворень в сильно кислому та сильно лужному середовищах, а в широкому інтервалі рН (2-10) існують в інтенсивно забарвленій однозарядній катіонній формі, що робить їх зручними для застосування в реакціях утворення ІА. Встановлено, що для спектрофотометричних характеристик досліджених барвників спостерігаються кореляції положення смуги поглинання із величинами параметрів донорного і акцепторного чисел розчинників за Гутманом.

В результаті даної роботи методами спектрофотометрії та кольориметрії вивчені кислотно-основні властивості низки катіонних барвників: катіонного рожевого 2С, катіонного червоного GRH, катіонного коричневого, катіонного червоного 4G, катіонного червоного 5G, катіонного темно-синього 2К та катіонного оранжевого Ж і визначені відповідні величини рК їх функціональних груп. Використання величин кольориметричних функцій іонно-молекулярних форм барвників у якості аналітичного сигналу дозволяє отримати більш цілісну картину про існуючі кислотно-основні рівноваги в широкому інтервалі рН середовища.

Спектрофотометричне визначення форм ванадію (IV) та (V) після дисперсійної рідинно-рідинної екстракції їх комплексів з похідними 6,7-дигідроксибензопірилію

Демчук А. В., Снігур Д. В.

Одеський національний університет імені І.І. Мечникова,

вул. Всеволода Змієнка, 2, 65082 Одеса

e-mail: uzymbar@gmail.com

Однією з найважливіших та найскладніших проблем сучасної аналітичної хімії залишається розробка методів визначення форм існування елементів, зокрема їх різних ступенів окиснення (speciation analysis, речовинний аналіз). Визначення окремих форм ванадію набуває особливої актуальності через їхню значну різницю в токсикологічному впливі. Наприклад, ванадат-йон є токсичнішим за ванаділ-йон. Інтенсифікація антропогенної діяльності, зокрема промисловості, призводить до поступового збільшення концентрацій ванадію в навколишньому середовищі.

Реагенти 6,7-дигідрокси-2,4-диметилбензопірилію (ДМДОХ), 6,7-дигідрокси-2-феніл-4-метилбензопірилію (МФДОХ) та 6,7-дигідрокси-2,4-дифенілбензопірилію (ДФДОХ) у вигляді бромідних або перхлоратних солей одержували конденсацією пірогалолу А з відповідними β-дикарбонільними сполуками в середовищі оцтової кислоти в присутності відповідної мінеральної кислоти.

Досліджено умови взаємодії ванадію(V) та ванадію(IV) з 2,4-заміщеними похідними 6,7-дигідроксибензопірилію та встановлено, що взаємодія відбувається в кислому середовищі, при чому введення фенільних замісників до складу реагенту зсуває комплексоутворення в більш кислу область. Стехіометрія продуктів взаємодії становить 1:3 не залежно від реагенту та валентного стану ванадію. Найбільш стійкими та інтенсивно забарвленими є комплекси з МФДОХ та ДФДОХ. Для визначення форм ванадію(V) та ванадію(IV) було застосовано 6,7-дигідрокси-2-феніл-4-метилбензопірилії бромід (МФДОХ). Дослідження екстракційних властивостей показало, що найбільш ефективним органічним розчинником для вилучення комплексів є хлороформ. Виявлено, що введення 1 см³ (10%) диметилформаміду (ДМФА) призводить до пригнічення утворення комплексу з V(IV). Оптимальним дисперсійним розчинником є метанол. Загальний об'єм органічної суміші становив 2,5 см³ для екстракції з 10 см³ водної фази. В оптимізованих умовах побудовано калібрувальні залежності для спектрофотометричного визначення ванадію(IV) та ванадію(V) з МФДОХ після дисперсійної рідинно-рідинної екстракції. Для обох форм лінійний діапазон калібрувальних графіків становить 12,75–612 мкг/дм³. Вміст (табл. 1) форм ванадію визначали за різницею між результатами екстракційно-спектрофотометричного визначення за відсутності ДМФА (загальний ванадій) та при його додаванні (ванадій(V)).

Табл. 1. Результати визначення вмісту форм V(IV) і V(V) (n=3; P=0,95)

Зразок	Введено, мкг/л	Знайдено, мкг/л		Знайдено ICP – OES, мкг/л
		V(IV)	V(V)	
Модельна суміш 1	V(IV) 75; V(V) 75	73,2±4,2	76,1±4,8	155±9
Модельна суміш 2	V(IV) 100; V(V) 45	98,3±5,9	44,7±2,9	155±9
Водопровідна вода	-	<LOD	<LOD	-
	V(IV) 50; V(V) 50	52,1±2,6	49,7±2,3	104±5

Таким чином, в результаті даної роботи запропоновано методику екстракційно-спектрофотометричного визначення форм Ванадію (IV, V).

Навчання учнів алгоритмам хімічного компостування в рамках формування екологічної компетентності на уроках хімії та біології

Жила Т.Ю.

Мелітопольський державний педагогічний університет імені Богдана Хмельницького, вул. Наукового містечка, 59, м. Запоріжжя, Запорізька область, Україна, 69000

e-mail: tz189071@gmail.com

Навчання учнів алгоритмам хімічного компостування в рамках формування екологічної компетентності на уроках хімії та біології проводиться з метою правомірного використання відходів органічної природи, як поживних речовин хімічного компостування, для збалансованого культивування рослин на присадибних ділянках. Такий підхід до вторинного перероблення органічних відходів, здатний сприяти збільшенню родючості ґрунту, а також, швидкому встановленню екологічної рівноваги. В рамках дослідження, було встановлено закономірності співвідношення азотовмісних матеріалів в процесах розкладання органічних відходів, значення впливу аеробних мікроорганізмів на якість аерації ґрунту, шляхи підтримки вологості новоствореного компосту, проведено оцінку впливу температурних показників, та виявлено оптимальний температурний режим хімічного компостування (65 °C). На практичних заняттях хімії та біології використано наступні матеріали: кавова гуща, шкарлупа яєць, оплодні овочів та фруктів, зокрема: цедра апельсинів та лимонів, фітонутрієнти моркви, перикарпій помідорів; паперові рушники, необроблений картон, зразки соломи та сіна, вода питна. Обладнання практичного експерименту: лопатка, компостний термометр, аналізатор ґрунту А-400 (для встановлення вмісту азоту, фосфору, калію, рівня рН середовища), датчик вологості ґрунту (гігрометр) FC-28, гумові рукавички, контейнери для відбору матеріалів ґрунту. Учні розглянуто оцінку якості встановленого дренажу під час хімічного компостування з метою безперервного надходження води. Стабільність процесу хімічного компостування забезпечено вирівнюванням поверхні ґрунту. Виявлено позитивний вплив на розглянуті процеси наявності ґрунтових комах. Оптимальне співвідношення азотовмісних сполук встановлено на рівні 1:30. Рекомендовано контролювати постійні показники рН середовища для ефективної діяльності ґрунтових комах та мікроорганізмів ґрунту. Оптимальним рівнем вологості, оцінено датчиком за допомогою гігрометру, виявлено показники 58-60%. Експериментальним шляхом визначено, що надмірне зволоження покращує небажані процеси гниття та виникнення сторонніх неприємних запахів. Навчання учнів алгоритмам хімічного компостування на уроках хімії та біології, сприяло збільшенню родючості ґрунту на присадибних ділянках міста Запоріжжя, й популяризації екологічного підходу до перероблення відходів органічної природи серед дітей старшого віку.

Список використаної літератури

- [1] Бондар О. І., Барановська В. Є., Єресько О. В. Екологічна освіта для сталого розвитку у запитаннях та відповідях: науково-методичний посібник для вчителів / за ред. О. І. Бондаря, 2011. 228 с.
- [2] Закон України «Про управління відходами» № 2320-IX, від 08.08.2025, Відомості Верховної Ради (ВВР), 2023, № 17, ст. 75. <https://zakon.rada.gov.ua/laws/show/2320-20#n802>.
- [3] Дослідження процесу побутового компостування органічних відходів рослинного походження / Разно М. Р., Тихомирова Т. С., Босюк А. С., Шестопапов О. В. Екологічні науки. 2025. № 1 (58). С. 316-323.

Низькотемпературне окиснення діоксиду сульфуру киснем в присутності хемосорбційно-каталітичних композицій на основі ферум(III) хлориду та природних носіїв різного походження

Кавалжи О.М., Бакуменко А.-Д. В., Лагутова А.Д., Кіосе Т.О.

Одеський національний університет імені І.І. Мечникова,

вул. Всеволода Змієнка, 2, 65082, Одеса, Україна

e-mail: kavalzhy_o@ukr.net

Діоксид сульфуру належить до найбільш розповсюджених токсичних компонентів атмосферного повітря, джерелами надходження якого є як природні, так і техногенні процеси. Сучасні методи його видалення переважно базуються на адсорбційних механізмах із використанням природних і синтетичних цеолітів, активованого вугілля, різних вуглецевих сорбентів, а також на хемосорбції за участю оксидів металів. Аналіз наукових джерел показує, що сполуки 3d-металів здатні каталізувати процес окиснення SO_2 як у рідкій фазі, так і в краплинному середовищі. Однак розчинені металокомплексні каталізатори окиснення SO_2 мають обмежене застосування в практиці очистки повітря. Перспективним напрямом вважається використання металокомплексних сполук, закріплених на твердих носіях, однак їх активність у взаємодії з SO_2 вивчена недостатньо. В роботі в якості сорбентів діоксиду сульфуру та носіїв композицій на основі ферум(III) хлориду використовували зразки природних мінералів різного походження: природний цеоліт – клиноптилоліт (П-Кл), шаруватий алюмосилікат – бентоніт (П-Бент(Д) та дисперсний кремнезем – трепел (П-Тр). Встановлено, що використані в роботі природні сорбенти не є дійсними мінералами і характеризуються складним фазовим складом. У природному клиноптилоліті окрім домінуючою фазою клиноптилоліту ($> 70\%$), містяться домішкові фази α -кварцу, морденіту, гематиту; в природному бентоніті поряд з основною фазою монтморилоніту в різних кількостях присутні кальцит, α -кварц і аморфний SiO_2 ; тоді як трепел є кристалічним мінералом, що містить чотири основні фази – α - SiO_2 , α -тридиміт, β -кристобаліт і α -кристобаліт. Кількісними характеристиками процесу окиснення діоксиду сульфуру в присутності композицій $\text{FeCl}_3/\bar{S}$ ($\bar{S}$ – П-Кл, П-Бент, П-Тр) є τ_0 , хв – час досягнення проскоку SO_2 ; $\tau_{\text{ГДК}}$, хв – час захисної дії, впродовж якого кінцева концентрація SO_2 досягає гранично-допустиму для робочої зони ($\text{ГДК}_{\text{SO}_2} = 10 \text{ мг/м}^3$); $Q_{\text{досл.}}$ – кількість моль SO_2 , яка поглиналась в реакції; n – стехіометричний коефіцієнт, який у разі композиції $\text{FeCl}_3/\bar{S}$ визначається з урахуванням реакції: $2 \text{FeCl}_3 + \text{SO}_2 + 2\text{H}_2\text{O} = 2 \text{FeCl}_2 + \text{H}_2\text{SO}_4 + 2\text{HCl}$.

З урахуванням результатів, узагальнених у табл. видно, що для всіх композицій $\text{FeCl}_3/\bar{S}$ кількість SO_2 , що прореагувала, значно перевищує $Q_{\text{теор.}}$; стехіометричний коефіцієнт $n \gg 1$, що свідчить про хемосорбційно-каталітичний процес. Активність композиції $\text{FeCl}_3/\bar{S}$ залежить від природи носія; параметри $\tau_{\text{ГДК}}$ і $Q_{\text{досл.}}$ зростають в наступній послідовності П-Кл < П-Бент(Д) < П-Тр(К-П).

Таблиця. Кінетичні та стехіометричні параметри реакції окиснення діоксиду сульфуру киснем в присутності природних сорбентів та композицій на їх основі

$$C_{\text{Fe(III)}} = 1,0 \cdot 10^{-6} \text{ моль/г; } C_{\text{SO}_2}^{\text{II}} = 150 \text{ мг/м}^3; t = 20 \text{ }^\circ\text{C}$$

Зразки	τ_0 , хв	$\tau_{\text{ГДК}}$, хв	$\tau_{1/2}$, с	$Q_{\text{досл.}} \cdot 10^4$, моль SO_2	$Q_{\text{теор.}} \cdot 10^6$, моль SO_2	n
П-Кл	-	-	300	0,09	-	-
$\text{FeCl}_3/\text{П-Кл}$	10	15	1260	0,44	0,5	88
П-Бент	10	15	2100	1,11	-	-
$\text{FeCl}_3/\text{П-Бент}$	25	30	3900	1,57	0,5	314
П-Тр	5	10	3900	0,96	-	-
$\text{FeCl}_3/\text{П-Тр}$	15	40	4800	1,86	0,5	372

Кристалічна структура та електрохімічне гідрування фази $(\text{La,Zr})(\text{Ni,Mg,Al})_5$

*Калитовський І.В., Зелінська О.Я.,
Павлюк В.В, Зелінський А.В., Кордан В.М.*

Львівський національний університет імені Івана Франка,
вул. Кирила і Мефодія, 6, 79005 Львів
e-mail: ihor.kalytovskyi@lnu.edu.ua

На сьогодні розвиток техніки і електроніки не можливий без удосконалення джерел енергії. Чільне місце серед акумуляторів посідають нікель-металогідридні (Ni-MH), які стали ефективнішими, енергоємнішими та екологічно безпечнішими заміниками токсичних нікель-кадмієвих (Ni-Cd) аналогів. Тому метою цієї роботи є синтез анодного матеріалу на основі легованої похідної інтерметалічної сполуки (ІМС) LaNi_5 , відомої завдяки добрим водень-сорбційним властивостям, дослідження його фазового складу і електрохімічного гідрування. Раніше автори дослідили споріднену до цієї фази з Zr, Mg та Sn або Ga як легуючими компонентами [1,2]. Заміщення олова або галію на алюміній дозволяє зменшити загальну масу сплаву, зберігаючи при цьому його здатність до накопичення водню. Це особливо вигідно для застосувань, де маса є критичним фактором, наприклад, у портативних пристроях для зберігання водню, тому в цій роботі ми провели синтез похідного LaNi_5 з Zr, Mg та Al як легуючими добавками.

Синтез сплаву проводили методом сплавляння чистих металів в електродуговій печі (Ar-атмосфера, Ti-гетер) з наступним гомогенізаційним відпалом у муфельній печі протягом двох тижнів за температури 400°C та гартуванням у холодній воді без розбивання ампул. Рентгенофазовий аналіз виконували за масивами порошкових даних, одержаних на дифрактометрі ДРОН-2.0М (Fe $K\alpha$ -проміння), використовуючи програму PowderCell. Повнопрофільне уточнення дифрактограми провели методом Рітвельда за допомогою програми FullProf. Електрохімічне гідрування здійснювали у прототипі акумулятора типу "Swagelockcell". Подрібнений зразок, змочений 6М розчином KOH, виконував роль анода. Як катод використовували змочену електролітом суміш свіжовиготовленого нікель(II) гідроксиду та графіту. Тестування зразків здійснювали в гальваностатичному режимі, для отримання заряд-розрядних кривих використали гальваностат МТЕСН-G-410-2. Морфологію поверхні зразка до та після електрохімічного гідрування дослідили за допомогою електронного мікроскопа Tescan Vega3 LMU з EDX-системою Oxford Instruments.

Рентгенофазовий аналіз та скануюча електронна мікроскопія досліджених металічних шліфів виявили утворення фази $\text{La}_{0,7}\text{Zr}_{0,3}\text{Ni}_{4,4}\text{Mg}_{0,3}\text{Al}_{0,3}$, що, як і бінарний аналог, кристалізується в структурі типу CaCu_5 (ПГ $P6/mmm$). Окрім основної фази, на дифрактограмі зразка присутні відбиття від ZrNi_5 (СТ AuBe_5 , ПГ $F-43m$). Результати електрохімічного гідрування синтезованого анодного матеріалу показали, що він добре сорбує водень, демонструючи високу ефективність та час розряду ($\tau_{\text{розр.}} \approx 3,85$ год, $\eta = 96,15\%$).

- [1] Калитовський, І. В.; Зелінська, О. Я.; Кордан, В. М.; Зелінський, А. В.; Дмитрів, Г. С.; Павлюк, В. В. Синтез, фазовий аналіз та електрохімічне гідрування сплаву на основі LaNi_5 , легованого Zr, Mg та Sn. Вісник Львівського університету. Серія хімічна. 2025, 66, с. 94–101.
[2] Kalytovskyi, I. V.; Zelinska, O. Ya.; Zelinskiy, A. V.; Kordan, V. M.; Pavlyuk, V. V. Phase composition and electrochemical properties of LaNi_5 doped with Zr, Mg, and Ga. Збірник наукових праць: XX Наукова конференція «Львівські хімічні читання – 2025», Львів, 2–4 червня 2025 року; Львів: ЛНУ імені Івана Франка, 2025; с. 138.

Конверсія н-бутанолу з одержанням продуктів С–С сполучення на модифікованих Са-Р-оксидних каталізаторах

Карпов М. Є., Зікрата О. В., Ларіна О. В.

Інститут фізичної хімії ім. Л. В. Писаржевського НАН України,

просп. Науки, 31, 03028 Київ

e-mail: maksymkarpov@ukr.net

Останнім часом наукова спільнота зосереджує зусилля на пошуці способів зменшення використання нафти через її невідновлюваність. Так, хімічна промисловість переходить від вуглеводнів, отриманих з викопного палива, до більш стійкої сировини, зокрема біоетанолу. Біоетанол можна використовувати для синтезу н-бутанолу, який, на відміну від етанолу, може застосовуватися не лише як добавка до палива, а й безпосередньо як паливо [1]. Також з етанолу можна виробляти 2-етилгексан-1-ол, який використовують у виробництві пластифікаторів, екологічно безпечних мийних засобів, розчинників.

Гідроксиапатит (ГАп) розглядається як промислово важливий каталізатор процесів конденсації спиртів за Гербе завдяки своїм біфункціональним властивостям та можливостям іонного обміну. Механізм процесу полягає у взаємодії двох молекул спирту, у результаті чого утворюється більш високомолекулярний і часто розгалужений спирт, який містить суму атомів вуглецю реагентів, та передбачає перебіг таких реакцій: дегідрування спирту, альдольна конденсація, дегідратація, гідрування [2]. Ключовими у цьому процесі є реакції: дегідрування, альдольної конденсації, які перебігають на основних центрах поверхні каталізатора. Хоча ГАп є природним мінералом, його можна синтезувати методом співосадження, щоб забезпечити контроль над складом і структурою [1].

Метою цієї роботи є з'ясування впливу рідкоземельних елементів, таких як Sc, Y та La, на каталітичні властивості ГАп у реакції конденсації н-бутанолу за Гербе в проточному режимі за температури 225 °С та атмосферного тиску.

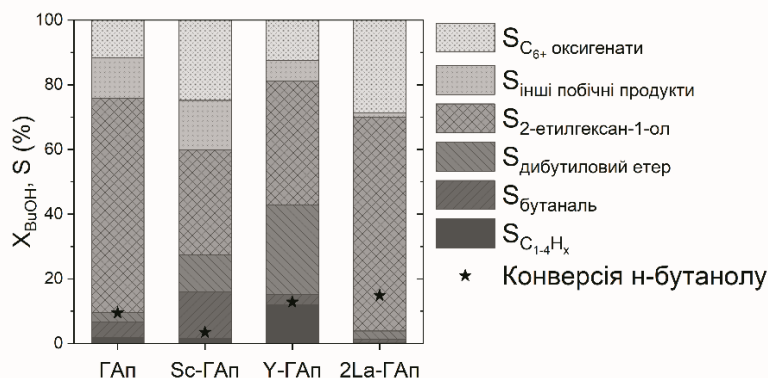


Рис. 1. Діаграма конверсії н-бутанолу та селективності за продуктами на (Sc, Y, La)- ГАп.

Встановлено, що додавання La до НАп підвищує основність поверхні каталізатора, що, у свою чергу, прискорює перебіг ключових реакцій цільового процесу - дегідрування та альдольної конденсації. За 225 °С в присутності La-ГАп конверсія н-бутанолу досягає 15% та селективність за продуктами конденсації (2-етилгексан-1-ол та інші C_{6+} оксигенати) – до 95% (рис. 1).

- [1] Daniyal Kiani and Jonas Baltrusaitis. 2021. Surface chemistry of hydroxyapatite for sustainable n-butanol production from bio-ethanol. *Chem Catal* 1, 4 (September 2021), 782–801. <https://doi.org/10.1016/j.checat.2021.06.005>
- [2] Dries Gabriëls, Willinton Yesid Hernández, Bert F. Sels, Pascal Van Der Voort, and An Verberckmoes. 2015. Review of catalytic systems and thermodynamics for the Guerbet condensation reaction and challenges for biomass valorization. *Catal Sci Technol* 5, 8 (August 2015), 3876–3902. <https://doi.org/10.1039/c5cy00359h>

Каталізатор Pd/Mn із вторсировини для очистки газів від CO*Носачов К.О.¹, Іваненко О.І.¹, Трипольський А.І.², Бичко І.Б.², Носачова Ю.В*¹Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут
імені Ігоря Сікорського»

проспект Берестейський, 37, м. Київ, 03056, Україна

²Інститут фізичної хімії ім. Л. В. Писаржевського

проспект Науки, 31, м. Київ, 03028, Україна

e-mail: k.nosachov@gmail.com

Монооксид вуглецю є високотоксичним газом, небезпечним для здоров'я людини та довкілля. За санітарними нормами його граничні концентрації в повітрі становлять 5 мг/м³ як максимальна разова та 3 мг/м³ як середньодобова. Через масштабні викиди та шкідливий вплив CO належить до найнебезпечніших атмосферних забруднювачів. Для видалення монооксиду вуглецю з газових викидів застосовують метод каталітичного окиснення, який описується реакцією:



Основними джерелами CO в атмосфері є викиди підприємств металургійної, хімічної, теплотехнічної та нафтохімічної промисловості. Найефективнішими каталізаторами окиснення CO є метали платинової групи та оксидні системи, серед яких шпінельні й піролюзитові контакти та паладій-марганцеві каталізатори.

Метою даної роботи було розробка способу приготування та виготовлення партії паладіймарганцевого каталізатора з масовою часткою 0,1% з вторинної сировини для потреб промислового підприємства. Джерелом паладію слугував лом паладійвмісних сплавів, зокрема паладій вольфрамових. Метал вилучали афінажем, що передбачав розчинення у царській воді з утворенням H₂PdCl₆, осадження домішок платини та виділення паладію у вигляді паладозаміну [Pd(NH₃)₂Cl₂]. Після прожарювання та відновлення мурашиною кислотою отримували губчастий паладій, з якого готували децинормальний розчин нітрату паладію. Піролюзит надходив із гірничо-збагачувальних комбінатів, мав фракційний склад від 7–10 мм, які становили 46,4%, 5–7 мм становили 47,3%, частки до 5 мм становили 6,3%. Питома маса дорівнювала 2,8 г/см³, порозність 0,5. Методом ВЕТ за ізотермою адсорбції–десорбції азоту визначали поверхню піролюзиту. Проведений аналіз показав, що, площа поверхні становить 38 м²/г, об'єм пор 0,001 см³/г, а середній діаметр пор 8,5 нм. Для визначення елементного складу піролюзиту застосовували метод рентгенофлуоресцентної спектроскопії. Виходячи з аналізу експериментальних даних, основний склад піролюзиту становить 85% Mn, 8% Fe, 4,5% Ca, а решта 2,5% присутні як домішки. Вологомісткість піролюзиту, показник який враховується під час приготування каталізатора, становила 10,5%. Приготування каталізатора включає стадії формування стабільної активної фази та її рівномірного розподілу на носії. Спершу піролюзит фракціонують до частинок 5–7 мм, промивають дистильованою водою для видалення домішок і сушать при 200 °C протягом 24 годин для усунення вологи та запобігання агломерації. Потім матеріал просочують децинормальним розчином нітрату паладію з масовою часткою паладію 0,1% протягом 24 годин із 10 % надлишком розчину, в залежності від вологомісткості після чого сушать при 250 °C протягом 24 годин для фіксації паладію, формування активних центрів і підвищення термічної стабільності каталізатора.

Досліджено температурну залежність конверсії монооксиду вуглецю на чистому піролюзиті та на Pd/MnO₂ у діапазоні 120–280 °C при вхідній концентрації O₂ 22,5 %, CO 1,4 % та об'ємній швидкості 2250 год⁻¹. Для чистого піролюзиту активність різко зростає в інтервалі 150–200 °C, тоді як для піролюзиту, модифікованого 0,1 % паладієм, основний стан якого PdO, підвищення конверсії відбувається вже при нижчих температурах, у діапазоні 120–150 °C.

Композити на основі хімічно-модифікованих кальцій фосфатів з феритом купруму: синтез та дослідження

Комащенко Є.О., Бебкевич О.М., Струтинська Н.Ю.
Київський національний університет імені Тараса Шевченка
вул. Володимирська, 64/13, 01601 Київ
e-mail: evakoma0809@gmail.com

Актуальною проблемою для сучасної ортопедії залишається пошук і розробка матеріалів для відновлення кісткової тканини. Серед численних кандидатів виділяють кальцій фосфати, зокрема апатитового типу $(\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2)$ і їх біфазні суміші з β - $\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2$, через притаманні їм біосумісність та нетоксичність. Для розширення функціоналізації такої біокераміки магнітними характеристиками можуть бути створенні їх композиції з феритами. Такі матеріали є перспективними для контрольованої доставки лікарських засобів і в області магнітної гіпертермії. Ще одним підходом цілеспрямованого впливу на функціональні властивості кальцій фосфатного матеріалу, може бути легування його катіонної та аніонної підґратки. Допування катіонами натрію та магнію дозволяє впливати на біоактивність та фазовий склад отриманих сполук, катіони ж купруму за певних концентрацій можуть чинити антибактеріальну дію та впливають на процеси ангіогенезу. Серед аніонних модифікацій, звертають увагу на заміщення фосфату на карбонат, що також присутній у апатитах природнього походження, а у синтетичних матеріалах впливає на швидкість біорезорбції. На біологічні властивості також впливають борат-аніони.

Метою роботи було дослідження особливостей формування композитів на основі кальцій фосфатів, легованих катіонами натрію та магнію, з феритами купруму, з одночасним модифікуванням аніонної підґратки. А також вивчення впливу модифікацій структури кальцій фосфату на фазовий склад та зміну рН модельного розчину.

Зразки було синтезовано з водних розчинів за мольних співвідношень: $\text{Ca}^{2+} : \text{Mg}^{2+} : \text{Na}^+ : \text{PO}_4^{3-} : \text{CO}_3^{2-} : \text{Cu}^{2+} : \text{Fe}^{3+} = (9.625-x/2) : 0.25 : 0.25 : (6-x) : x : 0.45 : 0.9$, ($x = 0$ та 0.5) і $\text{Ca}^{2+} : \text{Mg}^{2+} : \text{Na}^+ : \text{PO}_4^{3-} : \text{BO}_3^{3-} : \text{Cu}^{2+} : \text{Fe}^{3+} = 9.625 : 0.25 : 0.25 : 5.5 : y : 0.45 : 0.9$ ($y = 0.5$ та 2.5), що передбачало формування модифікованих кальцій фосфатів з 10 мас.% купрум фериту, з наступним їх нагріванням при 600°C . За результатами порошкової рентгенографії встановлено формування монофазних кальцій фосфатів апатитового типу $(\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2)$, що належать до гексагональної сингонії (пр. гр. $R\bar{6}_3/m$), з вмістом фериту 10 мас.%. Згідно результатів ІЧ-спектроскопії підтверджено часткове заміщення фосфату на карбонат чи борат-аніони, за їх присутності у складі вихідного розчину. Встановлено, що підвищення вмісту борат-аніону у вихідному розчині сприяє реалізації заміщення OH^- на BO_2^- .

Встановлено вплив аніонного модифікування кальцій фосфату у композитах з феритом міді, на характер зміни рН модельного розчину протягом 72 годин досліджень. Отримані результати можуть бути використані у розробці матеріалів з розширеними функціональними властивостями спеціального призначення для потреб сучасної ортопедії.

Роботу виконано за фінансової підтримки Національного фонду досліджень України (реєстраційний номер №2023.03/0109).

Оптимізація фракціонування гумінових речовин у ґрунтових екстрактах та спектроскопічне дослідження отриманих фракцій

Літвінов М.О.¹, Попірний М.А.², Крикля (Камнева) Н.М.^{1,2}, Решетняк О.О.¹

¹Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна, пл. Свободи, 4, 61022, Харків, Україна

²Національний науковий центр «Інститут ґрунтознавства та агрохімії імені О.Н. Соколовського», вул. Михайла Семенка, 4, 61024, Харків, Україна

e-mail: litvinov2025xb13@student.karazin.ua

Сьогодні ґрунтові гумінові кислоти (ГК) розглядаються як надмолекулярні агрегати, що складаються з різноманітних низькомолекулярних молекул (утворених в результаті біодеградації органічного матеріалу ґрунту) відносно невеликого розміру, самоасоційованих та стабілізованих переважно гідрофобними силами та водневими зв'язками, і які можуть самоорганізуватися у складніші та більшого розміру міцелярноподібні агрегати з фрактальною структурою (кластеризація агрегатів генерує дендритні мережі, при цьому останні описуються з точки зору непроникного для розчинника ядра, оточеного шаром ліофільного матеріалу) [1]. Тому гумінові агрегати останнім часом представляють як ароматичне гідрофобне внутрішнє ядро, стабілізоване зовнішніми шарами амфіфільних та полярних молекул, що надають гідрогельподібної структури подібного до самоорганізованого м'якого матеріалу [1].

Фізико-хімічна характеристика великих гетерогенних ґрунтових ГК потребує певної ефективної неінвазивної процедури фракціонування для отримання відносно малих за розміром гомогенних фракцій, що має вирішальне значення для моніторингу та прогнозування ступеня та інтенсивності гуміфікації та якості органічної речовини в сільськогосподарських ґрунтах особливо в умовах інтенсивного землеробства [1, 2]. Методи фракціонування, такі як ексклюзійна хроматографія (ЕХ), використовуються для зменшення гетерогенності ГК ґрунту [1, 2]. Однак існують перешкоди для ефективного молекулярного фракціонування ГК: на профіль елюювання впливає іонна взаємодія та адсорбція на стаціонарній фазі колонки, яка залежить від ароматичних структур та функціональних груп з наявністю низькомолекулярних артефактів, фульватів та солей, що утворюються під час процедури екстракції [2]. Основною метою нашої роботи було продемонструвати та запропонувати послідовну процедуру ЕХ для більш ефективного та оптимального фракціонування ГК ґрунтових екстрактів за розміром та спектроскопічне дослідження отриманих фракцій.

Наш метод включає послідовне розділення: спочатку використовують гель Sephadex G-25 та дистильовану воду як елюент, що дозволяє відокремити та сконцентрувати надмолекулярні гетерогенні ГК великих розмірів від фульватів, інших низькомолекулярних солей та замінити розчинник з лужних ґрунтових екстрактів на дистильовану воду (що дозволяє використовувати воду як оптимальний елюент у другому фракціонуванні і запобігти або зменшити абсорбцію). Наступним етапом є застосування гелю G-150 з використанням дистильованої води як елюенту для подальшого розділення відносно малих за розміром і низькомолекулярних «будівельних блоків», що утворюють надмолекулярні агрегати ГК, зібрані на першому етапі хроматографії. Такий підхід дозволив отримати більш чіткі хроматографічні піки, розчини в максимумах цих піків було досліджено УФ-видимою спектрофотометрією та спектрофлуориметрією.

[1] Angelico R. And at all. Humic Substances: From Supramolecular Aggregation to Fractal Conformation-Is There Time for a New Paradigm? Appl. Sci. 2023, 13, 2236.

[2] Daichi Asakawa, Yasuo Iimura, Takuro Kiyota, Yukiko Yanagi, Nobuhide Fujitake. Molecular size fractionation of soil humic acids using preparative high performance size-exclusion chromatography. Journal of Chromatography A, 1218 (2011) 6448–6453.

Каталітична активність композиту координаційного полімеру $[Pd(2\text{-Румо})_2]_n$ на вугіллі у реакціях С-С сполучення ароматичних галогенідів та боронових кислот

Пашкевич В.В.,^{1,2} Котенко І.С.,¹ Тереміленко А.В.,¹ Курмач М.М.,¹ Колотілов С.В.¹

¹ Інститут фізичної хімії ім. Л.В.Писаржевського НАН України, просп. Науки 31,
03028 Київ;

² ТОВ НВП "Єнамін", Україна, 02094, Київ, вул. Черчилля Вінстона 78

E-mail: pashkevych.viacheslav@gmail.com

Сучасна органічна хімія висуває високі вимоги до каталітичних систем, здатних ефективно каталізувати реакції крос-сполучення ароматичних галогенідів. Застосування координаційних полімерів відкриває нові можливості для зниження вартості каталізу, забезпечує високу каталітичну активність навіть за низького вмісту паладію, а також характеризується підвищеною хімічною та термічною стабільністю.

З метою зменшення кількості паладію, необхідного для здійснення реакцій С-С сполучення, було синтезовано низку композитів на основі координаційного полімеру $[Pd(2\text{-Румо})_2]_n$, нанесеного на активоване вугілля марки Norit. Композити відрізнялися за вмістом ПКП. У рамках дослідження було охарактеризовано зразки з вмістом ПКП 10 мас.% та 1 мас.%. Було проведено серію експериментів із варіюванням маси каталізатора при постійній концентрації реагентів (0,108 моль/л для боронової кислоти та 0,097 моль/л для арилгалогеніду).

На основі отриманих результатів можемо зробити ряд висновків:

1. Каталізатори на основі $[Pd(2\text{-Румо})_2]_n$, нанесені на активоване вугілля, демонструють високу активність у реакціях С-С сполучення навіть при низькому вмісті паладію
2. Індукційний період не є однозначною функцією ані маси каталізатора, ані вмісту паладію.
3. Наявність/відсутність індукційного періоду не пов'язана лінійно з кількістю паладію у системі
4. Зменшення маси каталізатора до 0,001 мольн. % не призводить до втрати активності чи появи індукційного періоду, що є важливим з точки зору зменшення використання дорогоцінного металу.

Методом хемосорбції СО після відновлення паладію оцінено максимальний розмір наночастинок паладію, які можуть утворюватися при відновленні такого металу у складі ПКП. Із застосуванням одержаного композиту вдалося досягти ефективного перебігу реакції С-С сполучення арилгалогенідів та боронових кислот при вмісті паладію в реакційній суміші на рівні 0,001 мольн. %, що робить такі системи перспективними для масштабного застосування в органічному синтезі.

Одним з важливих аспектів дослідження каталітичної активності комплексу $[Pd(2\text{-Румо})_2]_n$ було тестування каталізатора на реакціях крос-сполучення з різними фенілбороновими кислотами, включаючи незаміщену фенілборову кислоту та її похідні як з електронодонорними, так і з електроноакцепторними замісниками. Усі ці реакції продемонстрували високі виходи біарилів, що перевищують 80%, що свідчить про високу каталітичну активність каталізатора в цих процесах.

Таким чином, в ході проведеного дослідження було показано, що каталізатори на основі координаційного полімеру $[Pd(2\text{-Румо})_2]_n$, нанесені на активоване вугілля, демонструють високу активність у реакціях крос-сполучення ароматичних галогенідів. При цьому навіть при низькому вмісті паладію в системі досягається ефективний перебіг реакцій. Отримані результати підтверджують, що зменшення кількості паладію не призводить до втрати каталітичної активності, що робить ці системи перспективними для масштабного застосування в органічному синтезі.

Відновне N-метилування ароматичних нітросполук на азотовмісних вуглецевих нанотрубках

Стець В.Ю.¹, Бичко І.Б.¹

¹ Інститут фізичної хімії ім. Л. В. Писаржевського НАН України, пр. Науки, 31, 03028 Київ

e-mail: vladstets24@gmail.com

Допування вуглецевих нанотрубок (ВНТ) неметалами з близькими до вуглецю атомними радіусами (N, P, S,) створює нові активні центри на поверхні, що збільшує каталітичну активність матеріалу. Серед одержаних матеріалів виділяються азотовмісні вуглецеві нанотрубки (N-ВНТ), що продемонстрували ефективність у реакціях відновлення, зокрема при гідруванні нітросполук, таких як 4-нітрофенол та нітробензол. Метою даної роботи було дослідження каталітичних властивостей азотовмісних вуглецевих нанотрубок у реакціях відновного N-метилування ароматичних нітросполук у рідкій фазі.

Каталітичні властивості N-ВНТ, синтезованих шляхом розкладу ацетонітрилу на Ni/CaO каталізаторі, досліджували у реакціях відновного N-метилування нітросполук, таких як нітробензол, 2-нітротолуол, 3-нітротолуол, 4-нітротолуол, 2,4-динітротолуол, 4-метил-3-нітроанілін та 1,3-динітробензол. Реакцію проводили у реакторі високого тиску за температури 150°C та тиску 40 бар протягом 24 год. Одержані N-ВНТ аналізували такими методами, як ПЕМ, СЕМ, РФА, Раманівська спектроскопія, РФЕС, адсорбція/десорбція азоту, термогравіметричний аналіз та ІЧ спектроскопія.

Продуктами відновного N-метилування ароматичних нітросполук є відповідні аміни, а також вторинні та третинні N-метил заміщені аміни відповідних нітросполук, як наведено на схемі 1. Відповідно, на поверхні N-ВНТ перебігають як окисно-відновна реакція гідрування нітрогрупи так і кислотно-основні реакції N-метил заміщення амінів, що вказує на біфункціональну природу каталізатору.

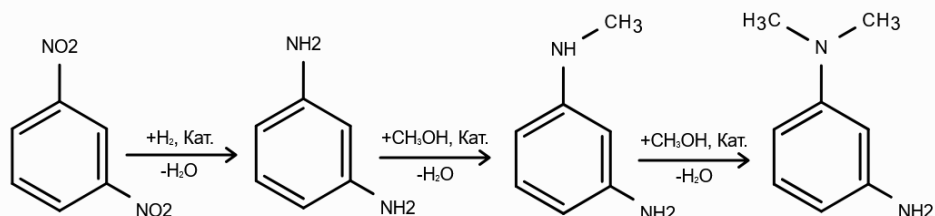


Схема 1. Відновне N-алкілювання 1,3-динітробензолу до N,N-диметил-1,3-діамінбензолу на N-ВНТ.

Також було досліджено вплив допування атомами азоту та карбоксильних груп на каталітичну активність N-ВНТ. Результати свідчать, що нітробензол не відновлюється до аніліну за участі ВНТ, що не містять азоту, в той час як вихід аніліну за участі N-ВНТ становить 87,5%, що вказує на збільшення каталітичної активності за умови допування ВНТ атомами азоту. Порівняння конверсії у відновному N-метилуванні ароматичних нітросполук за участі декарбоксильованих N-ВНТ (N-ВНТ-300), та початкових N-ВНТ показало, що вихід аміну у присутності N-ВНТ-300 значно нижчий ніж у присутності необроблених N-ВНТ. Утворення вторинних та третинних амінів у присутності N-ВНТ-300 не фіксується. Таким чином, аналіз отриманих результатів вказує на те, що карбоксильні групи на поверхні N-ВНТ є активними центрами реакції N-метилування.

Вилучення іонів перехідних металів з водних розчинів матеріалами на основі фосфорильованих тетрагідроксикаліксаренів

Сіроус В.О.¹, Брильова К.Ю.¹, Беліков К.М.¹, Кальченко В.І.², Бойко Ю.С.²

¹Інститут хімії функціональних матеріалів Науково-технологічний комплекс "Інститут монокристалів" Національної академії наук України, пр. Науки, 60, 61072 м. Харків

²Інститут органічної хімії НАН України, вулиця Академіка Кухаря, 5, 02094, Київ,

e-mail: sirous@isc.kh.ua

Сучасні методи аналітичної хімії потребують розробки високоефективних та селективних сорбентів для вилучення токсичних металів із водних розчинів. Особлива увага приділяється іонам ртуті через їхню високу токсичність та потенційну небезпеку для здоров'я людини. Метою даного дослідження було вивчення можливостей фосфорильованих тетрагідроксикаліксаренів як сорбентів для селективного вилучення іонів ртуті з водних середовищ.

Фосфорильовані тетрагідроксикаліксарени є макроциклічними сполуками з високою спорідненістю до катіонів металів, що забезпечує утворення стабільних комплексів. Завдяки цим властивостям вони становлять значний інтерес для застосування у процесах концентрування та аналітичного визначення металів у низьких концентраціях.

Було протестовано низку сорбентів із ковалентно пришитими похідними фосфорильованих калікс[4]аренів. Найвищу ефективність продемонстрував матеріал із пара-трет-бутильними замісниками на верхньому ободі.

Для оцінки сорбційних властивостей застосовано атомно-емісійний спектрометр з індуктивно зв'язаною плазмою (ICP-AES). Експерименти проводилися у контрольованих умовах із використанням буферних розчинів, що дало змогу визначити вплив рН та складу середовища на процес комплексоутворення. Такий підхід забезпечив точну та відтворювану оцінку ефективності сорбентів та їх селективності відносно ртуті серед інших перехідних металів.

Було встановлено, що досліджуваний сорбент здатний вилучати іони ртуті з ефективністю до 97 % при рН 5,5. Ізотерма сорбції в цьому випадку найкраще описується рівнянням Ленгмюра. Водночас ступінь вилучення практично не залежить від наявності співіснуючих катіонів.

Отримані результати мають практичне значення для аналітичної хімії та фармацевтичної галузі. Розроблений сорбент може бути використаний для концентрування ртуті у лікарських препаратах та контрольованих водних системах. Крім того, застосування фосфорильованих каліксаренів відкриває перспективи створення нових матеріалів для селективного вилучення токсичних металів із навколишнього середовища, що надає дослідженням вагомое екологічне та аналітичне значення.

Термодинамічні властивості 4,7-діоксо-7-фенілгептанової кислоти

Огороднік М.Я.¹, Собечко І.Б.¹

¹ Національний університет «Львівська політехніка»,
вул. Степана Бандери, 12, 79013 Львів
e-mail: marta.y.ohorodnik@lpnu.ua

Вивчення термодинамічних характеристик органічних сполук є важливим етапом у з'ясуванні їхньої стабільності, реакційної здатності та можливостей практичного застосування в різних галузях хімії й фармацевтики. Особливий інтерес становлять гетероциклічні сполуки та молекули з різними функціональними групами. Серед них фенациллевулінові кислоти привертають увагу як багатфункціональні сполуки, здатні до широкого спектра хімічних перетворень, а також як біологічно активні речовини, що проявляють антиоксидантні, протизапальні та протимікробні властивості.

Енергію згорання 4,7-діоксо-7-фенілгептанової кислоти визначали за допомогою калориметра В-08-МА з ізотермічною оболонкою ($\pm 0,003$ К). Енергетичний еквівалент калориметричної системи ($W=10343\pm 10$ Дж/В) встановлювали за результатами спалюванням еталонної бензойної кислоти марки К-1, теплота згорання якої становить $\Delta U_{\text{бк}} = -26434,4$ Дж/г.

За стандартних умов досліджувана кислота перебувала у твердому агрегатному стані. Зразки попередньо пресували у таблетовану форму, що забезпечувало зручність під час експерименту та стабільність. Таблетки розміщували в платиновій чашці. Ініціація горіння здійснювалася розрядом конденсаторів через ніхромовий дріт, який запалював бавовняну нитку. Початковий тиск кисню, очищеного від легкозаймистих домішок, вуглекислого газу та водяної пари, становив 30 кПа. У всіх дослідах температура на початку основної стадії залишалася сталою – 298,15 К.

Після кожного акту згорання проводили кількісний аналіз продуктів реакції з метою виявлення вмісту монооксиду та діоксиду вуглецю, сажі та нітратної кислоти. Кількість CO_2 визначали методом Россіні з похибкою $\pm 2 \cdot 10^{-4}$ г. Точність газового аналізу підтверджувалася серією контрольних експериментів з еталонною бензойною кислотою. Вміст CO контролювали в окремих серіях досліджень за допомогою індикаторних трубок з точністю $\pm 5 \cdot 10^{-6}$ г. Сажу, що утворювалася на внутрішній поверхні платинової чашки, визначали методом зважування з аналогічною точністю. Концентрацію HNO_3 встановлювали титруванням 0,1-нормальним розчином KOH .

Результати визначення енергій згорання 4,7-діоксо-7-фенілгептанової кислоти кислоти та повноту згорання наведено в табл. 1.

Табл. 1. Результати експериментального визначення енергій згорання досліджених у роботі речовин

$m_{\text{речовини}},$ г	$\Delta T,$ В	$q_{\text{нитки}},$ Дж	$q_{\text{HNO}_3},$ Дж	$q_{\text{вуглецю}},$ Дж	$-U,$ Дж /г	$m_{\text{CO}_2}^{\text{exp}} / m_{\text{CO}_2}^{\text{calc}}$
0,31274	0,81805	91,9	6,5	33,6	26848	0,9925
0,32770	0,85501	100,2	5,9	32,8	26762	0,9901
0,28730	0,75071	80,2	1,8	19,7	26809	0,9979
0,31205	0,81469	95,2	5,6	27,9	26770	0,9951
0,31020	0,81194	108,6	1,8	17,4	26773	0,9989
0,28468	0,74150	88,5	6,5	53,5	26794	0,9941
0,29252	0,76313	91,0	6,2	43,2	26799	0,9982
Середнє значення: $\Delta U = -26794 \pm 19$ Дж/г						

Адсорбційне вилучення шестивалентного хрому композитами глауконіт/поліанілін: кінетика та механізм процесу

Сидорко М. С., Яцишин М. М.

Львівський національний університет імені Івана Франка,
вул. Кирила і Мефодія, 6, 79005, м. Львів, Україна
e-mail: sydorkomaria98@gmail.com

Стічні та природні води дедалі частіше містять токсичні неорганічні домішки, серед яких особливу небезпеку становлять іони важких металів. Шестивалентний хром (Cr(VI)) відомий канцерогенністю є високо розчинним і рухливим, що зумовлює його накопичення в біосфері та потрапляння у харчові ланцюги. Враховуючи, що звичайні мінеральні сорбенти, як от природні мінеральні глини, не завжди забезпечують достатній рівень вилучення Cr(VI), актуальним є створення композитних матеріалів із розширеним спектром адсорбційних центрів та додатковою відновлювальною здатністю.

Як адсорбенти досліджено композити на основі природного глауконіту та електропровідного полімеру поліаніліну (Гл/ПАН), синтезовані *in situ* окисненням аніліну амонійпероксодисульфатом у середовищі H_2SO_4 за різного масового співвідношення Гл:ПАН (від 1:1 до 5:1). Морфологію та хімічний склад зразків вивчали за допомогою скануючої електронної мікроскопії у поєднанні з енергодисперсійною X-променевою спектроскопією, що дало змогу підтвердити рівномірне покриття частинок мінералу поліаніліном та наявність хрому після сорбції. Структурні зміни полімерної складової визначали методом ІЧ-Фур'є спектроскопії та УФ–В спектроскопії. Адсорбційні експерименти проводили у статичних умовах із вихідними концентраціями Cr(VI) 50–250 мг/л.

Встановлено, що тільки ПАН є активною фазою композитів, тоді як Гл є матрицею-носієм. Зі збільшенням частки Гл в композитах спостерігається зниження як швидкості, так і ступеня вилучення Cr(VI), що узгоджується зі зменшенням кількості адсорбційних центрів.

Кінетика видалення за концентрації поллютанта 250 мг/л зображена на рис. 1. Криві демонструють багатостадійний характер процесу: швидку початкову фазу впродовж перших 20–30 хв, подальше уповільнення та досягнення рівноваги через 24 год. Зі збільшенням вмісту Гл спостерігається систематичне зниження як швидкості, так і граничного ступеня вилучення Cr(VI). Найвищу ефективність показав чистий ПАН (~90 %), тоді як композит Гл/ПАН (1:1) забезпечив близько 50 % видалення, а зразки з більшим вмістом Гл – ще нижчі значення. Такі відмінності пов'язані зі зменшенням кількості адсорбційних центрів якими є аміно- та аміногруппи ПАН.

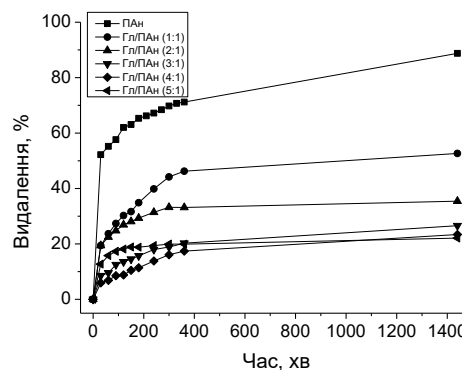


Рис. 1. Кінетика адсорбційного вилучення Cr(VI) з водного розчину початкової концентрації 250 мг/л зразками ПАН та композитів Гл/ПАН із різним масовим співвідношенням компонентів (1:1–5:1) за температури 20 ± 1 °C у статичних умовах.

ІЧ-ФП та УФ–В спектри після сорбції виявляють зміщення характеристичних смуг ПАН та появу піків, що відповідають коливанням групи $\text{Cr}=\text{O}$, а також перехід полімеру до пернігранілінової форми. Це свідчить про часткове відновлення Cr(VI) до менш токсичного Cr(III) за участю аміно- та іміногруп ПАН, які виконують функцію електронних донорів і комплексоутворювачів. Таким чином, поліанілінові композити реалізують комбінований механізм – електростатичне притягання, поверхневе комплексування та відновлення поллютанту.

Отримані результати підтверджують перспективність застосування композитів Гл/ПАН для глибокого очищення водних середовищ від токсичних сполук хрому.

Застосування аналітичних методів для оцінки *in vitro* ефективності доставки тикагрелору через назогастральний зонд

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

¹ ТДВ «ІНТЕРХІМ»

² Фізико-хімічний інститут ім. О.В. Богатського НАН України,

Люстдорфська дорога, 86, 65080, Одеса

e-mail: yegorovalla@gmail.com

Ентеральне введення ліків через зонди є кращим методом для пацієнтів, які не можуть безпечно ковтати. Розробка аналітичних методик кількісного визначення для проведення моніторингу ефективності доставки лікарських препаратів через назогастральний (НГ) зонд є важливим завданням [1].

В роботі було розроблено та валідовано нові методики кількісного визначення для моніторингу повноти вилучення та стабільності тикагрелору (ТГ) при введенні його через назогастральний зонд (*in vitro*). Умови проведення дослідження вказані у FDA Draft Guidance on Ticagrelor. Досліджуваний лікарський засіб - ТИКАГРЕЛОР, таблетки, вкриті плівковою оболонкою, по 90 мг та референтний лікарський засіб - БРИЛІНТА, таблетки, вкриті плівковою оболонкою, по 90 мг, АстраЗенека АБ.

Метод УФ-спектроскопії: вимірюють оптичну густину випробовуваного розчину та розчину порівняння за довжини хвилі 300 нм у кюветі з товщиною шару 1 см відносно компенсаційного розчину (ацетонітрил:вода (35:65 об/об)). Результати ступеня вилучення: більш ніж 94 % ТГ вилучається після суспендування у воді та введення через НГ зонд (ризик закупорки або непрохідності трубки низький); довірчий інтервал (90 %-й) оцінки відношення ТИКАГРЕЛОР/БРИЛІНТА (досліджуваний препарат до референтного) середньгеометричних значень ступеня вилучення склав: для часу змочування 0 хв – 100,53 % / 102,37%; для часу змочування 120 хв – 99,45 % / 101,44%. Значення нижньої та верхньої меж 90 % довірчих інтервалів задовольняють вимогам (80,00 %; 125,00 %).

Для моніторингу стабільності ТГ після суспендування розтертих таблеток у середовищі (деіонізованій воді) та доставки через НГ зонд проводили визначення супровідних домішок методом ВЕРХ, відповідно до вимог Державної фармакопеї України. Хроматографування проводили за таких умов: колонка з нержавіючої сталі розміром 0,15 м × 4,6 мм, заповнена силікагелем для хроматографії октадецилсилільним (1,8 мкм); рухома фаза А: змішують 1 об'єм буферного розчину та 89 об'ємів води для хроматографії та додають 10 об'ємів ацетонітрилу для хроматографії; рухома фаза В: змішують 1 об'єм буферного розчину та 29 об'ємів води для хроматографії та додають 70 об'ємів ацетонітрилу для хроматографії; використовували градієнт; детектування за довжини хвилі 242 нм; температура колонки 55 °С; об'єм інжекції 5 мкл; час утримування піка тикагрелору близько 15 хв.

Визначення супровідних домішок тикагрелору на виході із трубки НГ зонду (час змочування – 120 хв), не перевищує нормування за ICH M9 (не більше 10 %) та регламентації: неспецифіковані домішки не більше 0,2 % кожної домішки; сума домішок не більше 0,5 %.

За результатами валідації встановлено, що наведені методики є специфічними, характеризується коректною правильністю, прецизійністю, лінійною залежністю в вивченому діапазоні концентрацій, що дозволяє використовувати їх для проведення порівняльних досліджень повноти вилучення та стабільності при вивченні доставки лікарського засобу тикагрелору через НГ зонд *in vitro*.

[1] Oral Drug Products Administered Via Enteral Feeding Tube: In Vitro Testing and Labeling Recommendations Guidance for Industry. DRAFT GUIDANCE. June 2021, Pharmaceutical Quality

«Зелені» альтернативи тротилу як основа сумішевих вибухових речовин

Верташ Д.С.¹, Косіцина О.С.¹, Загинайко Є.С.²

¹ Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара, просп. Науки, 72, 49045, Дніпро

² Дніпропетровський НДЕКЦ МВС України, туп. Будівельний, 1, 49000, Дніпро
e-mail: vertash@365.dnu.edu.ua

Однією з найбільш масових і відомих бризантних вибухових речовин (ВР) є тротил (ТНТ). Особливістю ТНТ є його унікальна фізико-хімічна властивість – температура плавлення знаходиться в тепловому діапазоні нижче, ніж температура деструкції, що дозволяє використовувати його в якості литтєвої ВР для наповнення боєприпасів різної форми. Основним недоліком використання ТНТ є токсичність як самого ТНТ, так і продуктів його вибухового перетворення. Тому актуальним є пошук речовин, що матимуть низьку токсичність, низьку температуру плавлення та високі енергетичні властивості. Важливим аспектом для пошуку тротил-замінних речовин є технологія їх переробки (лиття). Виділяють два методи лиття ВР – гаряче та холодне. Гаряче лиття – метод утворення розплаву легкоплавких речовин, в якому дисперговані тугоплавкі високопотужні речовини.

Одними з тротил-замінних ВР є Tris-X, TNAZ та DNBF (табл.1), що мають властивості литтєвих ВР та є привабливими для використання завдяки високій стабільності та підвищеній ефективності у порівнянні з існуючими сумішевими ВР військового призначення.

Табл. 1. Тротил-замінні ВР

ВР	Температура плавлення, °C	Густина, г/см ³	V _{детонації} , м/с
2,4,6-трис(2-нітроксіетилнітраміно)-1,3,5-триазин (Tris-X)	68-69	1,73	8700
1,3,3-тринітроазетидін (TNAZ)	101	1,84	9597
4,4'-динітро-3,3'-біфуразан (DNBF)	85	1,92	8800

Недоліками даних ВР є висока вартість їх виробництва, чутливість (для Tris-X та DNBF) та незначна леткість, що потребує оптимізації виробничого процесу у випадку застосування в системах, що наразі використовують ТНТ [1].

Останнім часом привертає увагу композиція IMX-104, що складається з 2,4-динітроанізола (DNAN), гексогену (RDX) та 3-нітро-1,2,4-триазолону-5 (NTO). Такий склад композиції демонструє гарні характеристики, що робить її безпечною та цікавою альтернативою ТНТ [2].

Холодне лиття – метод, що реалізується за рахунок застосування полімерів (як високо-, так і низькоенергетичних), та диспергування в них тугоплавких високопотужних речовин (PBX). Можливі наступні варіанти реалізації цього підходу:

1. Використання суміші рідкого полімеру, високопотужної ВР та ініціатора полімеризації.

2. Суміш полімеру, високопотужної ВР та нітроефірів нагрівають, у результаті чого полімер набухає. В якості вибухових речовин у такому сумішевому ВР використовують RDX, HMX, PETN, CL-20 та FOX-7, а полімерним зв'язуючим є BDNPA та BDNPAF, polyGLYN, GAP, polyNIMMO, AMMO, BAMO [3].

[1] Agrawal, J. P. *High Energy Materials Propellants, Explosives and Pyrotechnics*; 2010.

[2] NDIA Conference Proceedings. <https://ndia.dtic.mil/wp-content/uploads/2012/IMEM/13852zunino9B.pdf> (дата звернення 13.09.2025)

[3] Simon Quellen Field. *Boom! The Chemistry and History of Explosives*; Chicago Review Press: Chicago, Illinois, 2017.

Хіміко-аналітична характеристика 3-гідрокси-4'-карбоксифлавоу як флуоресцентного зонда для визначення нуклеозидфосфатів

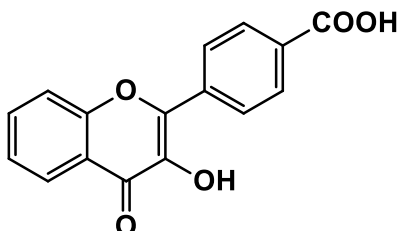
Лях К.А., Коршенко Л.І., Главін А.Б., Линник Р.П., Пивоваренко В.Г.

Київський національний університет імені Тараса Шевченка

01601, Київ, вул. Володимирська, 64/13

e-mail: katherineliakh@gmail.com

Флуоресцентні методи досліджень набули широкої популярності за рахунок високої чутливості визначення, можливості біовізуалізації та поєднання з методами розділення і концентрування. Флуоресцентні зонди на основі флавонолів широко використовуються для визначення катіонів металів, аніонів органічної та неорганічної природи, біомолекул. Вибірковість взаємодії при цьому визначається особливостями будови молекули зонда [1]. Важливим індикатором порушення нормального функціонування клітин організму, спричиненого появою патологічних процесів, може бути зміна в клітинному середовищі концентрації аденозинових нуклеотидів, зокрема аденозин 5'-фосфатів [2]. Визначення їхнього вмісту в біологічних об'єктах важливе у медико-біологічній діагностиці, а пошук нових сполук для створення флуоресцентних зондів, які здатні забезпечувати детектування мікромольних концентрацій аденозин 5'-фосфатів, вбачається актуальним завданням.



Мета роботи – дослідження хіміко-аналітичних характеристик похідної 3-гідроксифлавоу – 4-(3-гідрокси-4-оксо-4Н-хромен-2-іл)бензойної кислоти, а також її сенсорних властивостей щодо аденозинових нуклеотидів.

Досліджено спектральні характеристики 3-гідрокси-4'-карбоксифлавоу у органічних розчинниках різної полярності та воді. Спектри поглинання сполуки містять три смуги, найбільш довгохвильова з яких має максимум за довжини хвилі ~350 нм. У спектрах флуоресценції спостерігається інтенсивна смуга, максимум якої знаходиться, залежно від розчинника, в діапазоні 529–555 нм. Таким чином, для досліджуваної сполуки характерний значний Стоксів зсув, який досягає 180–200 нм. Значення pK_a дисоціації 3-ОН-групи досліджуваного 3-гідроксифлавоу, встановлене спектрофотометричним методом Комаря, становить $8,42 \pm 0,09$, що узгоджується з даними щодо інших сполук цього класу. Методом флуоресцентної спектроскопії досліджено взаємодію 3-гідрокси-4'-карбоксифлавоу з аденозин 5'-трифосфатом (АТФ), аденозин 5'-дифосфатом (АДФ) і аденозин 5'-монофосфатом (АМФ). Показано, що в присутності АТФ і АДФ у спектрі флуоресценції з'являється нова смуга, а інтенсивність свічення значно зростає при збільшенні концентрації цих нуклеозидфосфатів, тоді як АМФ майже не впливає на свічення. Досліджено вплив рН на взаємодію 3-гідрокси-4'-карбоксифлавоу з АТФ, кінетику утворення асоціату, встановлено його стехіометричний склад і стійкість. З'ясовано вплив АДФ і АМФ на флуоресценцію асоціату 3-гідрокси-4'-карбоксифлавоу з АТФ за різних співвідношень концентрацій.

[1] Pyrzynska K., Pękal A. Flavonoids as Analytical Reagents, Crit. Rev. Anal. Chem. 2011, 41(4), pp 335–345.

[2] Bradbury D.A., Simmons T.D. Measurement of the ADP:ATP ratio in human leukaemic cell lines can be used as an indicator of cell viability, necrosis and apoptosis. J. Immunol. Methods. 2000, 240, pp 79–92.

Визначення хрому (III та VI) у кухонній солі з використанням ультразвуку*Шевченко І.Р., Юрченко О.І., Бакланов О.М.*Харківський національний університет імені В.Н.Каразіна, майдан Свободи 4, 61022
Харківe-mail: ivan.shevchenko@student.karazin.ua

Для утворення ацетилацетонату хрому при кімнатній температурі в розчинах кухонної солі використано дію високочастотного ультразвуку з частотою 5,0–6,0 МГц, інтенсивністю 6,0–7,0 Вт/см² при часі дії не менше, ніж 3,0 хв. При використанні дії високочастотного УЗ для утворення ацетилацетонату хрому, ступінь вилучення хрому (III) із розчинів з концентрацією хлориду натрію 90 г/л та 120 г/л підвищується, порівняно з використанням УЗ низької частоти з 94,0 – 95,0% та 90,4 – 90,8% до 97,0 – 98,0% та 94,3 – 95,0% відповідно. Експериментально доведено, що утворення ацетилацетонату хрому відбувається саме під впливом ультразвуку і, зокрема, внаслідок кавітаційних ефектів, що викликають протікання звукохімічних реакцій. Показано, що обробка аналізованих розчинів УЗ зазначених параметрів не змінює стану хрому. Вивчено використання одночасної дії ультразвуку надвисокої частоти та ультразвуку низької частоти при руйнуванні розчинних органічних сполук хрому. Використання для руйнування розчинених органічних сполук хрому одночасної дії надвисокочастотного та низькочастотного ультразвуку у порівнянні з використанням одночасної дії високочастотного ультразвуку та ультразвуку низької частоти призводить до підвищення ступеню руйнування з 95-96 % до 98-99 %. Розроблено комплекс методик визначення вмісту хрому в кухонній солі у різних формах існування: хрому(III), хрому(VI) та хрому у формах з'єднань з органічними лігандами. Правильність методики перевірено методом «введено-знайдено», а також аналізом одним і тих же проб альтернативним методом. Межа виявлення хрому - 0,01 мг/кг. Правильність методики перевіряли методом добавок, а також аналізом одних і тих же проб альтернативними методами (табл. 1).

Таблиця 1 Результати визначення вмісту хрому (n = 6; P = 0,95)

Об'єкт аналізу	Введено Cr(III) або Cr(VI), мг/кг	Знайдено Cr, мг/кг / S _r (n=6)			
		Запропонованим методом		Методом згідно [1]	
		Cr(III)	Cr(VI)	Cr(III)	Cr(VI)
Без руйнування органічних речовин					
Кухонна сіль Генічеського солезаводу	0 0,100	0,080/0,047 0,177/0,043	0,134/0,048 0,231/0,044	0,076/0,052 0,167/0,051	0,127/0,054 0,217/0,055
Кухонна сіль Дрогобицького солезаводу	0 0,050	0,045/0,046 0,093/0,044	- 0,050/0,045	0,042/0,050 0,087/0,053	- 0,047/0,055
З руйнуванням органічних сполук одночасною дією ультразвуку частотою 10 МГц, інтенсивністю 7 Вт/см ² та ультразвуку частотою 22 кГц, інтенсивністю 1 Вт/см ² протягом 2 хв.					
Кухонна сіль Генічеського солезаводу	0 0,10	0,267/0,056 0,363/0,057		0,256/0,060 0,339/0,058	
Кухонна сіль Дрогобицького солезаводу	0 0,05	0,059/0,057 0,108/0,058		0,057/0,61 0,102/0,60	

АВТОРСЬКИЙ ПОКАЖЧИК

- Bohdan S. Sosunovych, 25
Bohdan V. Vashchenko, 25
Іваниця М. О., 63
Jean-Marie LEHN, 10
Karpenko Yu.V., 15
Кордубайло М.В., 22
Oleksandr O. Grygorenko, 25
Oleksii V. Gavrylenko, 25
Volodymyr S. Brovarets, 25
Yurii S. Moroz, 25
Абдуллаєв Е. Н., 63
Александрова Д.І., 79
Алексєєв С.О., 55
Алла Васькевич, 38
Амірханов В.М., 51, 52
Анастасія Мисяк, 38
Анохін Д.О., 26
Арабаджи М. І., 64
Бакланов О.М., 82
Бакуменко А.-Д. В., 68
Барладян Д.В., 65
Бахалова Є.А., 36
Бєбкевич О.М., 72
Бєзуглий М.Ю., 55
Бєліков К.М., 76
Бичко І.Б., 71
Бичко І.Б., 50, 75
Блажеєвський М.Є., 61
Боднарчук Л.М., 27
Боднарчук О.В., 27, 29, 30, 39
Бойко Ю.С., 76
Борисов О.В., 22
Брильова К.Ю., 76
Бур'янов В. В., 20
В. І. Гайдар, 59
Ващенко А.П., 28
Ващенко О.В., 23
Верещак В.О., 18
Верташ Д.С., 80
Вівсяник В.В., 29
Вірченко М.О., 65
Вовк М.В., 43, 44
Водолазська М.В., 17
Волочнюк Д. М., 20
Волочнюк Д.М., 21
Гавриш М.В., 30
Гавришевська П., 52
Гавріленко К. С., 63
Галавський С., 21
Галущенко В.С., 58
Гах М.А., 62
Гірський Ю. В., 60
Главін А.Б., 81
Гладков Є.С., 42
Головач С.М., 24
Гончаров В.О., 31
Горин М.М., 32
Греб В. М., 60
Григоренко О. О., 11
Григоренко О.О., 21, 24
Грозав А.М., 44
Гунченко П.О., 41
Гулько В.М., 34
Давтян А.С., 33
Данилюк І.Ю., 43
Демчук А. В., 66
Діденко Н.О., 36
Діхтярук Є.В., 34
Дорошук В.В., 55
Дручок М.І., 35
Дьяконенко В.В., 51
Єгорова А.В., 79
Жила Т.Ю., 67
Жуковецька О.М., 65
Загинайко Є.С., 80
Захаров А.Б., 26
Збруєв Олександр Ігорович, 8
Зелінська О.Я., 69
Зелінський А.В., 69
Зікрата О. В., 70
Златов Є.В., 48
Зоткін О.О., 22
Іваненко О.І., 71
Іваниця М.О., 20

- Іванов В.В., 26
Іващук О.С., 14
Кавалжи О.М., 68
Казаков О.А., 36
Калитовський І.В., 69
Калугін О.М., 26
Кальченко В.І., 76
Капелюха А.О., 46
Карпенко О.С., 48
Карпов М. Є., 70
Каряка Н.С., 51, 52
Качур А.В., 37
Кашуцький С.М., 79
Кемський С.В., 44
Кириченко О.В., 26, 42
Кіосе Т.О., 68
Кічкова М.Є., 48
Кленіна О.В., 62
Клименко Д.С., 21
Коваленко С.М., 26
Ковальчук А.Р., 14
Когут Ю.М., 56
Колос Н.М., 16
Колосова О.С., 28
Колосова Ольга Сергіївна, 6
Колотілов С. В., 20, 64
Колотілов С.В., 57, 63, 74
Комащенко Є.О., 72
Кордан В.М., 69
Коровін О.Ю., 58
Коршенко Л.І., 81
Косіцина О.С., 80
Котенко І. Є., 57
Котенко І.Є., 74
Котляр В.М., 16
Кравчук О.Ф., 16
Кривошей О.І., 28
Крикля (Камнева) Н.М., 73
Криськів Л.С., 61
Криськів О.С., 61
Кулик О.Г., 40
Курмач М.М., 53, 64, 74
Кучер Т.В., 61
Лагутова А.Д., 68
Ларіна О. В., 70
Линник Р.П., 81
Литвиненко А. С., 20
Літвінов М.О., 73
Логойда Л.С., 32, 35
Лях К.А., 81
Ляшук О. С., 11
Ляшук О.С., 21
Ляшук О.С., 24
Мазур Д. О., 20
Маханькова В.Г., 21
Мельников К. П., 11
Мельников К.П., 24
Мельниченко О.В., 64
Михайло Вовк, 38
Міллер В.Ю., 65
Мішура А. М., 63
Мороз Б.Л., 24
Мороз В.П., 61
Мороз М.В., 56
Мороз Ю.С., 46
Мяснікова Д.Ю., 23
Н.Д. Щербань, 53
Нечесний Я.І., 44
Носачов К.О., 71
Носачова Ю.В., 71
О.В. Литюга, 53
О.В. Швець, 53
Огороднік М.Я., 77
Остапчук Є.М., 64
П.С.Яремов, 53
Павлюк В.В., 69
Парійська О.О., 64
Пашкевич В.В., 74
Пашкевич В.П., 64
Пестерев Є.К., 45
Пивоваренко В.Г., 81
Піскач Л.В., 56
Плетеницька Т.О., 39
Поляков С.В., 53

- Пономаренко Т.В., 54
Попірний М.А., 73
Пузанов Б. О., 20
Радіонов П.М., 40
Радудік А.В., 48
Ребров О.Л., 54
Реброва Т.П., 54
Решетняк О.О., 73
Розанцев Г.М., 36, 47
Русакова Н.В., 51
Рябухін С. В., 20
Рябухін С.В., 21
Рябухін С.В., 43
Савлук Т.О., 19
Сараєв В.Є., 23
Сараєв Вячеслав Євгенійович, 7
Сахно Я. І., 23
Сахно Я.І., 31
Сахно Яна Ігорівна, 8
Селезень А.О., 56
Сидорко М. С., 78
Сисенко О.В., 79
Сіроус В.О., 76
Скрипинець Ю.В., 79
Слісенко О.В., 37
Смола С.С., 51, 52
Снігур Д. В., 66
Снігур Д.В., 65
Сніжко А.Д., 42
Собечко І.Б., 77
Солод Б.Ю., 43
Сотнік С. О., 20
Стаднік В. Є., 60
Стаднічук Т.С., 41
Стець В.Ю., 75
Стругацька М.Б., 51
Струтинська Н.Ю., 72
Суботін В.В., 64
Супрун В.Я., 14
Тарасенко В.В., 47
Тарасенко Д.О., 16
Тарханова О.О., 46
Татарець А.Л., 28, 40
Теребіленко А. В., 57
Теребіленко А.В., 74
Тімоніна Алвард Разміківна, 7
Токар А.В., 17
Трипольський А.І., 71
Труш В.О., 51
Фадєєва С.М., 18
Філатов А.А., 24
Циганков О.В., 18, 19
Чебанов В.А., 18, 19, 23, 31
Чеботарська І.І., 79
Чепелева Л.В., 42
Чергинець В.Л., 54
Черних А.В., 21
Черняєва О.І., 23
Швед О.М., 36, 47
Швець О. Г., 23
Шевченко І.Р., 82
Шевченко О.В., 48
Шишкіна С.В., 31, 51
Штанова Л.Я., 34
Юрченко О.І., 82
Ютілова К.С., 47
Яцишин М. М., 78

Наукове видання

**XV ВСЕУКРАЇНСЬКА КОНФЕРЕНЦІЯ МОЛОДИХ
ВЧЕНИХ, СТУДЕНТІВ ТА АСПІРАНТІВ
З АКТУАЛЬНИХ ПИТАНЬ ХІМІЇ**

Збірка праць

Видавець «ФОП Середняк Т.К.», 49000, Дніпро, 18, а/с 1212
Свідоцтво про внесення суб'єкта видавничої справи до Державного
реєстру

видавців, виготівників і розповсюджувачів видавничої продукції
ДК № 4379 від 02.08.2012.

Ідентифікатор видавця в системі ISBN 8648

49000, Дніпро, 18, а/с 1212

тел. (096)-308-00-38, (056)-798-04-00

E-mail: 7980400@gmail.com

Віддруковано на базі поліграфічно-видавничого центру «Кавун»

49018, Дніпро, 18, а/с 1212

тел. (066)-55-312-55, (056)-798-22-47

E-mail: arbuz.in.ua@gmail.com

www.arbuz.in.ua