

Міністерство освіти і науки України
Житомирський державний університет імені Івана Франка
Національний університет "Києво-Могилянська академія"
Донецький національний університет імені Василя Стуса
Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького
Інститут фізики напівпровідників НАН України
Інститут хімії поверхні НАН України



IX ВСЕУКРАЇНСЬКА НАУКОВА КОНФЕРЕНЦІЯ



АКТУАЛЬНІ ЗАДАЧІ ХІМІЇ:
ДОСЛІДЖЕННЯ ТА ПЕРСПЕКТИВИ

МАТЕРІАЛИ КОНФЕРЕНЦІЇ

Житомир
2025

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ЖИТОМИРСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ ІВАНА ФРАНКА
НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ “КИЄВО-МОГИЛЯНСЬКА АКАДЕМІЯ”
ДОНЕЦЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ ВАСИЛЯ СТУСА
ЧЕРКАСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ БОГДАНА ХМЕЛЬНИЦЬКОГО
ІНСТИТУТ ФІЗИКИ НАПІВПРОВІДНИКІВ НАН УКРАЇНИ
ІНСТИТУТ ХІМІЇ ПОВЕРХНІ НАН УКРАЇНИ

IX ВСЕУКРАЇНСЬКА НАУКОВА КОНФЕРЕНЦІЯ

«АКТУАЛЬНІ ЗАДАЧІ ХІМІЇ: ДОСЛІДЖЕННЯ ТА ПЕРСПЕКТИВИ» ЗБІРНИК МАТЕРІАЛІВ КОНФЕРЕНЦІЇ



9 квітня 2025 р.

м. Житомир

Житомир

УДК 061 54(06)
ББК Гя431
А 43

Рекомендовано до друку рішенням Вченої ради Житомирського державного університету імені Івана Франка (протокол № 5 від 28 березня 2025 року).

Посвідчення про реєстрацію в УкрІНТЕІ № 82 від 27 січня 2025 р.

IX Всеукраїнська наукова конференція «Актуальні задачі хімії: дослідження та перспективи» (9 квітня 2025 року).

Матеріали конференції. – Житомир: Житомирський державний університет імені Івана Франка, 2025. – 347 с., іл.

Збірник містить тези доповідей, у яких викладені результати наукових досліджень у галузях неорганічної та фізичної хімії, матеріалознавства та нанотехнологій, аналітичної хімії та хімії навколишнього середовища, хімії органічних та високомолекулярних сполук, теорії та методики навчання хімії. Дослідження виконані у навчальних закладах та наукових установах України та за кордоном.

Матеріали друкуються в авторській редакції.

Конференцію проведено відповідно до плану проведення наукових конференцій з проблем вищої освіти і науки в системі Міністерства освіти і науки України на 2025 рік

Співорганізатори конференції:

Національний університет "Києво-Могилянська академія"
Донецький національний університет ім. В. Стуса
Черкаський національний університет ім. Б. Хмельницького
Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України
Інститут хімії поверхні ім. О.О.Чуйка НАН України

Підтримка конференції: ТОВ «УкрХімАналіз»

Укладачі: *Н.В.Кусяк, В.В.Листван, О.Ю.Кичкирук*

Рецензенти збірника:

- *Старостенко Ольга Миколаївна* – кандидат хімічних наук, старший науковий співробітник відділу термостійких полімерів і нанокompозитів Інституту хімії високомолекулярних сполук НАН України, старший дослідник.
- *Прокопенко Сергій Леонідович* – кандидат хімічних наук, старший науковий співробітник відділу наноматеріалів Інституту хімії поверхні ім.О.О.Чуйка НАН України;
- *Заблоцька Ольга Сергіївна* – доктор педагогічних наук, професор, завідувач кафедри технологій медичної діагностики, реабілітації та здоров'я людини Житомирського медичного інституту Житомирської обласної ради

Адреса редколегії:

10008, м. Житомир, вул. Університетська, 42,
природничий факультет Житомирського державного університету
імені Івана Франка.

ISBN 978-966-485-297-2

© Житомирський державний університет імені Івана Франка,
2025

НАУКОВИЙ КОМІТЕТ КОНФЕРЕНЦІЇ

<i>Киричук Галина Євгеніївна</i>	ректор ЖДУ імені Івана Франка, д.б.н., проф., (голова);
<i>Анічкіна Олена Василівна</i>	завідувач кафедри хімії ЖДУ імені Івана Франка, к.п.н., доц.;
<i>Вакулюк Поліна Василівна</i>	завідувач кафедри хімії НаУКМА, д.т.н., проф.;
<i>Гетьман Євген Іванович</i>	професор кафедри фундаментальної та прикладної хімії факультету хімії, біології і біотехнологій ДонНУ імені Василя Стуса, д.х.н., проф.;
<i>Голуб Олександр Андрійович</i>	професор кафедри хімії НаУКМА, д.х.н., проф.;
<i>Горбик Петро Петрович</i>	зав. відділу наноматеріалів, заступник директора Інституту хімії поверхні ім. О.О.Чуйка НАН України, д.ф.-м.н., проф., чл.-кор. НАН України;
<i>Жильцова Світлана Віталіївна</i>	в.о. директора навчально-наукового інституту розвитку академічного потенціалу, доцент кафедри фундаментальної та прикладної хімії факультету хімії, біології і біотехнологій ДонНУ імені Василя Стуса, к.х.н., доц.;
<i>Картель Микола Тимофійович</i>	почесний директор Інституту хімії поверхні ім. О.О.Чуйка НАН України, д.х.н., проф., акад. НАН України;
<i>Кичирук Ольга Юріївна</i>	доцент кафедри хімії ЖДУ імені Івана Франка, к.х.н.;
<i>Кусяк Наталія Володимирівна</i>	доцент кафедри хімії ЖДУ імені Івана Франка, к.х.н.;
<i>Листван Віталій Володимирович</i>	доцент кафедри хімії ЖДУ імені Івана Франка, к.х.н.;
<i>Маланич Галина Петрівна</i>	заступник керівника відділу хімії і технології напівпровідників Інституту фізики напівпровідників ім. В.Є.Лашкарьова НАН України, к.х.н.
<i>Мінаєв Борис Пилипович</i>	професор кафедри хімії та наноматеріалознавства ЧНУ імені Богдана Хмельницького, д.х.н, проф.;
<i>Радіо Сергій Вікторович</i>	проректор з наукової роботи, доцент кафедри фундаментальної та прикладної хімії факультету хімії, біології і біотехнологій ДонНУ імені Василя Стуса, к.х.н., доц.;
<i>Розанцев Георгій Михайлович</i>	завідувач кафедри фундаментальної та прикладної хімії факультету хімії, біології і біотехнологій ДонНУ імені Василя Стуса, д.х.н., проф.;
<i>Романюк Руслана Костянтинівна</i>	декан природничого факультету, к.б.н., д.п.н., проф.;
<i>Томашик Василь Миколайович</i>	провідний науковий співробітник відділу хімії і технології напівпровідників Інституту фізики напівпровідників ім. В. Є. Лашкарьова НАН України, д.х.н., проф.;
<i>Туров Володимир Всеволодович</i>	директор Інституту хімії поверхні ім. О.О.Чуйка НАН України, д.х.н., проф., акад. НАН України;
<i>Тьортих Валентин Анатолійович</i>	зав. відділу хемосорбції та гібридних матеріалів Інституту хімії поверхні ім. О.О.Чуйка НАН України, д.х.н., проф.;
<i>Чеканов Максим Олександрович</i>	науковий співробітник Vertex Pharmaceuticals (USA), к.х.н.;
<i>Чумак Володимир Валентинович</i>	проректор з навчально-методичної та виховної роботи ЖДУ імені Івана Франка, к.х.н., доц.;
<i>Шендрик Олександр Миколайович</i>	в.о. декана факультету хімії, біології і біотехнологій, професор кафедри біофізичної хімії, фізики і педагогіки ДонНУ імені Василя Стуса, д.х.н., проф.

1. Jennings M.C. , Minbiole K.P.C. , Wuest W.M. . Quaternary ammonium compounds: an antimicrobial mainstay and platform for innovation to address bacterial resistance // *American Chemical Society (ACS) Infectious Diseases*/ - 2015. - Vol. 1(7). - P. 288-303.
2. Khan H.A. , Baig F.K. Nosocomial infections: Epidemiology, prevention, control and surveillance // *Asian Pacific Journal of Tropical Biomedicine*. – 2017. - Vol. 7(5).- P. 478-482.
3. Bureš F. Quaternary ammonium compounds: simple in structure, complex in application // *Topic in Current Chemistry*. - 2019. - Vol. 377(14). - P. 1-21.
4. Kim S-H. , Semenya D. , Castagnolo D. Antimicrobial drugs bearing guanidine moieties: A review // *European Journal of Medicinal Chemistry*. – 2021.-Vol. 216. - 113293.

DEVELOPMENT OF EXTRACTION-SPECTROPHOTOMETRIC METHOD FOR THE QUANTITATIVE DETERMINATION OF THE ANTIDEPRESSANT FLUOXETINE WITH METHYL ORANGE

Karpushyna S.A.,¹ Baiurka S.V.²

¹Uman National University of Horticulture, svitkrp@gmail.com

²National University of Pharmacy

Antidepressant poisonings occupy a leading position among the psychotropic drug intoxications all over the world. Fluoxetine (±)-N-Methyl-γ-[4-(trifluoromethyl)phenoxy]benzenepropanamine hydrochloride is a monocyclic antidepressant. Fluoxetine, sold under the brand name Prozac, is an antidepressant of the selective serotonin reuptake inhibitor (SSRI) class used for the treatment of major depressive disorder, anxiety, panic disorder. It is also approved for treatment of major depressive disorder in adolescents and children 8 years of age and over. [1, 2]. Serious side effects of fluoxetine include serotonin syndrome, mania, seizures, an increased risk of suicidal behavior in people under 25 years old, and an increased risk of bleeding [3]. Cases of acute and lethal poisoning by fluoxetine have been registered. Postmortem fluid and tissue distribution of fluoxetine were within the ranges for various biological samples: blood 1.3–6.8 mg/L, liver 29–128 µg/g, urine 5.5–19 mg/L. The main trend of bioanalytical method development for fluoxetine determination is the prevalence of column chromatography with mass spectrometric detection. However, these analytical methods are not always available for a toxicological laboratory.

The aim of the study was to develop simple and sensitive method for fluoxetine quantitative determination using extraction-spectrophotometry in the visible region of the spectrum with the methyl orange, an acidic azo dye, suitable for the chemical-toxicological analysis.

Materials and methods. Standard solution of the drug containing 100.0 µg/mL of the fluoxetine basic form (SS) was prepared and 0.1; 0.2; 0.3; 0.4; 0.5; 0.7; 0.9 mL aliquots of SS were taken for creating calibration curve. Absorbance of colored solutions was measured at 540±2 nm; 10 mm light pathway cuvette was used.

Results and discussion. To determine the optimal conditions of extraction-spectrophotometric method of the fluoxetine determination it has been previously found that methyl orange, an acidic azo dye (0.05% aqueous solution) formed the ionic associate with the drug in the medium of the acetate buffer of pH 4.6 which was extracted with chloroform. The colour of ionic associate solution (yellow) was low-intensive, so to enhance the sensitivity of the method the ionic associates formed was destroyed by addition of 1% sulphuric acid solution in absolute ethanol to the resulting chloroform layer. Thus, the colored red solution with a significantly higher absorption was obtained. The absorption values were processed by linear regression method. The equation of the regression line was the following: $y=0.00907 \times x; (r=0.999)$; LOD and LOQ values were, respectively, 2.1 µg and 6.2 µg in the sample. The linearity of the calibration curve was within the range of fluoxetine concentrations from 10.0 to 100.0 µg in the sample.

Conclusions. Thus, the extraction-spectrophotometric method developed satisfied the requirements of the chemical-toxicological analysis with respect to the sensitivity and can be used in toxicological study of the biological samples for the presence of fluoxetine.

1. Nuñez N.A. et al. Augmentation strategies for treatment resistant major depression: A systematic review and network meta-analysis // *Journal of Affective Disorders*. – 2022. V. 1. No 302. – P. 385-400.

2. Vas C. et al. Pharmacotherapy for Treatment-Resistant Depression: Antidepressants and Atypical Antipsychotics // *The Psychiatric clinics of North America*. – 2023. – V. 46. No 2. – P. 261-275.

3. Hetrick S.E. et al. New generation antidepressants for depression in children and adolescents: a network meta-analysis. // *Cochrane Database of Systematic Reviews*. – 2021. – V. 24. No 5. – CD013674.

QUANTUM-CHEMICAL STUDY OF SOLVATION AND ADSORPTION OF NATURAL POLYPHENOL CURCUMIN ON THE SURFACE OF SILICA ENTEROSORBENT

Kazakova O.O., Barvinchenko V.M., Lipkovska N.O.

Chuiko Institute of Surface Chemistry, NAS of Ukraine, kazakova_olga@ukr.net

Nanocomposites containing fumed silica and physiologically active compounds of plant origin, extracts and/or dispersions of medicinal plants combine the therapeutic effectiveness of bioactive molecules and a detoxifying action of enterosorbents. Their development requires detailed experimental and theoretical studies devoted to the interaction of silica with biologically active compounds. The study of the adsorption of natural polyphenol curcumin (CUR) from water-ethanol solutions ($\text{pH} = 5.8 \pm 0.2$) on the silica surface showed that CUR binds to the sorbent through the formation of hydrogen bonds between its carbonyl group and non-dissociated silanol groups on the silica surface ($\text{pK}_{\text{SiOH}} = 8$). Under these conditions curcumin also exists in molecular form, as evidenced by the value of its first dissociation constant ($\text{pK}_{\text{a1}} = 8.4$).

Quantum chemical methods were used to interpret experimental data and elucidate the role of enol and ketone tautomers of Cur in adsorption interactions. Full optimization of curcumin and model cluster of 36 $\text{SiO}_{4/2}$ tetrahedra was performed by the semi empirical PM3 method (package **GAMESS**) [1]. Hartree-Fock theory with 6-31G(d,p) basis and Kitaura-Morokuma method [2] were used to estimate the components of intermolecular interaction energy. The solvation model SM 5.42/PM3 and SM 5.42/6-31G(d) (GAMESSPLUS) [3] was used to calculate solvent effects for molecules, clusters and their complexes.

Since curcumin exists in solution in an equilibrium of ketone and enol forms, for which different structures are possible, Gibbs free energy calculations were performed for the most probable CUR conformers (Fig. 1) taking into account solvation effects. Three major conformers of the curcumin enol form (eCUR) and one conformer of the keto form (kCUR) were studied. The designation “*trans*-eCUR” indicates that the two phenol- OCH_3 groups are on opposite sides, and “*cis*-eCUR” means that they are on the same side. The symbols “*up*” and “*down*” refer to the position of the phenol $-\text{OCH}_3$ groups in relation to the $-\text{OH}$ and $\text{C} = \text{O}$ groups in the eCUR molecule and indicate that they are on the same or opposite sides, respectively.

In aqueous solution, curcumin in the keto form turned out to be the most stable (Table 1), since the difference in Gibbs free energies of the enol tautomers relative to the keto tautomer is positive and ranges from 13.5 for *trans*-eCUR to 16.1 kJ/mol for *cis-up*-eCUR. Unlike aqueous solutions, interaction with the silica cluster leads to stabilization of enol tautomers. Since the calculated energy of interaction with the silica cluster is maximal for the *cis-up* enol tautomer, further calculations were performed for it.

DEVELOPMENT OF EXTRACTION-SPECTROPHOTOMETRIC METHOD FOR THE QUANTITATIVE DETERMINATION OF THE ANTIDEPRESSANT FLUOXETINE WITH METHYL ORANGE <i>Karpushyna S.A., Baiurka S.V.</i>	194
QUANTUM-CHEMICAL STUDY OF SOLVATION AND ADSORPTION OF NATURAL POLYPHENOL CURCUMIN ON THE SURFACE OF SILICA ENTEROSORBENT <i>Kazakova O.O., Barvinchenko V.M., Lipkovska N.O.</i>	195
CONFORMATIONAL SAMPLING OF DUAL CK2/HDAC INHIBITORS BY CLUSTERING AND BOLTZMANN-TYPE DISTRIBUTION ANALYSIS IN DIFFERENT ENVIRONMENTS <i>Klenina O.V., Márquez-Cantudo L., Coderch C., de Pascual-Teresa B.</i>	197
INTERACTION OF POLYPHENOLS WITH MODEL MEMBRANES: A MOLECULAR DYNAMICS STUDY <i>Lonin D.O., Malovytsia U.K., Zhytniakivska O.A., Vus K.O., Trusova V.M., Gorbenko G.P.</i>	199
PHARMACOGNOSTIC POTENTIAL OF ESSENTIAL OIL PLANTS IN CREATING INNOVATIVE COSMETICS: THE EXPERIENCE OF THE “LAVENDER PROVINCE” <i>Paientko V.V., Kapitula A.V., Matkovsky A.K., Kustovska A.V., Grygorieva O.V.</i>	200
INNOVATIVE APPROACHES IN CREATING NATURAL COSMETICS: THE EXPERIENCE OF THE COMPANY "ZELENAHA" <i>Paientko V.V., Kurinna N., Matkovsky A.K., Wiśniewska M., Gladysz-Plaska A., Tkachuk O.</i>	202
“GREEN” NANOPARTICLES OF METALS AND NONMETALS IN ANIMAL AND POULTRY FEEDING <i>Tsekhmistrenko S.I., Polishchuk V.M., Rol N.V., Polishchuk S.A.</i>	204
РОЗРОБКА ЕКСТРАКЦІЙНО-СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧНОГО МЕТОДУ КІЛЬКІСНОГО ВИЗНАЧЕННЯ СЕРТРАЛІНУ ЗА РЕАКЦІЄЮ З НОВИМ АЗОБАРВНИКОМ – ПОХІДНИМ ТЕОФІЛІДИНУ <i>Баярка С.В., Карпушина С.А.</i>	206
ПОШУК БІОЛОГІЧНО АКТИВНИХ СПОЛУК В РЯДІ КАРБОНІЛВМІСНИХ 1,2,4-ТРИАЗОЛІВ <i>Борисенко Н.М., Губенко І.Я.</i>	207
ОЦІНКА ВЗАЄМОДІЇ ЛІКАРСЬКИХ ЗАСОБІВ, ЩО ЗДІЙСНЮЄТЬСЯ ЗА УЧАСТЮ ФЕРМЕНТІВ ЦИТОХРОМУ P450 – В РАМКАХ СЕКЦІЇ ХІМІЧНІ ПРЕПАРАТИ В БІОЛОГІЇ ТА МЕДИЦИНІ <i>Валіводзь І.П., Ларіонов В.Б., Головенко М.Я.</i>	208
ВПЛИВ КАЛІКС[4]АРЕНІВ C-107 ТА C-1130 НА Na ⁺ , K ⁺ -АТФазу ПЛАЗМАТИЧНОЇ МЕМБРАНИ ТА СКОРОТЛИВУ АКТИВНІСТЬ МІОМЕТРІЯ <i>Векліч Т.О., Цимбалюк О.В.</i>	211
ФУНГІЦИДНІ ВЛАСТИВОСТІ КОМПОЗИТНИХ МАТЕРІАЛІВ НА ОСНОВІ БІОЛОГІЧНО АКТИВНИХ КОМПОНЕНТІВ З ЦЕОЛІТОМ <i>Головань А.П., Сіора І.В., Крупська Т.В.</i>	215