

Київський національний університет імені Тараса Шевченка

Хімічний факультет



Тези доповідей

**XXVI Міжнародна конференція  
студентів, аспірантів і молодих вчених  
«Сучасні проблеми хімії»**

**БХФЗ**  **бсрр**



**КИЇВ, 14-16 травня 2025**

Київський національний університет імені Тараса Шевченка

Хімічний факультет

ТЕЗИ ДОПОВІДЕЙ

XXVI Міжнародна конференція  
студентів, аспірантів та молодих вчених  
«СУЧАСНІ ПРОБЛЕМИ ХІМІЇ»

Book of abstracts

XXVI International Conference  
for Students, PhD Students and Young Scientists  
«MODERN CHEMISTRY PROBLEMS»

**Київ, 14-16 травня 2025 р.**

## ОРГАНІЗАЦІЙНИЙ КОМІТЕТ КОНФЕРЕНЦІЇ

### Голова оргкомітету:

*Воловенко Юліан Михайлович*, декан хімічного факультету Київського національного університету імені Тараса Шевченка, д.х.н., професор

### Співголови оргкомітету:

*Куцевол Наталія Володимирівна*, заступник декана хімічного факультету, д.х.н., пров. н.с.

*Усенко Наталія Ігорівна*, заступник декана хімічного факультету, к.х.н., доцент

### Члени оргкомітету:

*Лампека Ростислав Дмитрович* – завідувач кафедри неорганічної хімії, д.х.н., професор;

*Савченко Ірина Олександрівна* – завідувач кафедри хімії високомолекулярних сполук, д.х.н., професор;

*Дорошук Володимир Олександрович* – в.о. завідувача кафедри аналітичної хімії, к.х.н., доцент;

*Григоренко Олександр Олегович* – завідувач кафедри органічної хімії, д.х.н., професор;

*Роїк Олександр Сергійович* – в.о. завідувача кафедри фізичної хімії, д.х.н., професор

**Секретар оргкомітету** - *Лисенко Олена Миколаївна* к.х.н., доцент

### Відповідальні за функціонування секцій

Кафедра аналітичної хімії

*Коржан Людмила Петрівна*, аспірантка кафедри аналітичної хімії,

*Лесик Дмитро Сергійович*, аспірант кафедри аналітичної хімії

Кафедра органічної хімії

*Ващенко Богдан Вікторович*, к.х.н., асистент кафедри органічної хімії

Кафедра неорганічної хімії

*Буханько Валерій Олександрович*, к.х.н., асистент кафедри неорганічної хімії,

*Войналович Артем Сергійович*, аспірант кафедри неорганічної хімії

Кафедра фізичної хімії

*Крейман Данило Сергійович*, аспірант кафедри фізичної хімії

Кафедра високомолекулярних сполук

*Парцевська Софія Василівна*, к.х.н., асистент кафедри ВМС



# АНАЛІТИЧНА ХІМІЯ

## ВАЛІДАЦІЯ МЕТОДИКИ ВИЗНАЧЕННЯ ПОЛЯРНИХ НІТРОЗАМІНІВ В ЛАКАХ ДЛЯ НІГТІВ РІЗНОГО ПРИЗНАЧЕННЯ

*Литвиненко В.Ю.<sup>1</sup>, Сиротчук О.А.<sup>2</sup>, Глушаченко О.О.<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Національний медичний університет імені О. О. Богомольця,

<sup>2</sup>ДП «Центральна лабораторія з аналізу лікарських засобів і медичної продукції»

м. Київ, Україна

iso6784985@gmail.com, syrotchuk@gmail.com, g\_o\_a@ukr.net

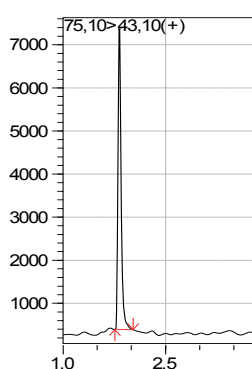
Нітрозаміни належать до забруднювачів 1-ї категорії з високим рівнем канцерогенного ризику, контрольованих у харчових продуктах, косметичних засобах і лікарських препаратах. Їх присутність є серйозною загрозою, що вимагає оперативного реагування. Тому метою роботи було провести валідацію аналітичної методики кількісного визначення NDMA та NDEA у зразках, яка включала б оцінку таких ключових характеристик, як лінійність, правильність, збіжність, межі виявлення та кількісного визначення.

Для цього було використано метод рідинної хроматографії з мас-детектуванням. Рідинний хроматограф Shimadzu Nexera LC-30 трьохкврупольним мас детектором Shimadzu LCMS 8040. У роботі використовували стандартний зразок NDEA, NDMA. Рухома фаза: вода для хроматографії, етанол 96 об. %, люкс, ДП «Укрспирт». Зразки лаків А та В з зазначеним вмістом згаданих нітрозамінів, що були визначенні при професійному тестуванні для мережі косметичних лабораторії Європейського директорату з аналізу якості лікарських засобів і медичної продукції.

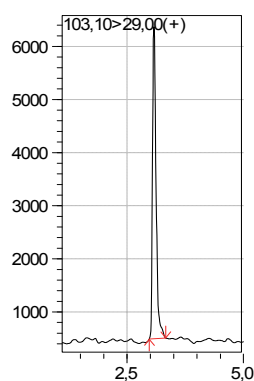
Умови хроматографування:

XBridge C18 150\*3/3. Рухома фаза: 0,1 % розчин мурашиної кислоти у воді для хроматографії + етанол 96%(80:20); Швидкість потоку: 0,4 мл/хв. Об'єм інжекції: 20 мкл. Температура: 45°C. Режим іонізації: АРСІ; позитивний режим; Лінія десольватації: 250 °С; температура нагрівача: 400 °С; Газ для розпилення: 3 л/хв; Оптимальні переходи (MRM): NDMA(75.1-43.1); NDEA(103.1-29.1).

У даних умовах отримано хроматограми стандартних зразків, які зображені на рис. 1 і 2.



**Рис. 1. Хроматограма NDMA**



**Рис. 2. Хроматограма NDEA**

Лінійність методики є важливою характеристикою аналітичного методу, що відображає пропорційність між концентрацією аналіту та аналітичним сигналом у заданому діапазоні. Для оцінки лінійності проведено дослідження залежності сигналу від концентрацій NDMA і NDEA в межах 1,25–12,5 нг/мл на п'яти рівнях концентрацій. Рівняння прямої для NDMA має вигляд  $Y = 9917,0 \times X - 738,3$ , для NDEA –  $Y = 13527,2 \times X - 1356,1$ . Значення коефіцієнтів кореляції склали  $r = 1,000$  для обох сполук, що свідчить про відмінну відповідність експериментальних даних лінійній моделі та повністю відповідає встановленим критеріям прийнятності ( $r \geq 0,999$ ). Вільний член рівняння є статистично незначущим для обох сполук.

Для NDMA вільний член становив  $-738,3$  при  $2 \times SD(a) = 1415,59$ , а для NDEA  $-1356,1$  при  $2 \times SD(a) = 1606,43$ . Отримані результати свідчать, що вільний член для NDMA є статистично незначущим. Межа кількісного визначення для NDMA становить  $0,714$  нг/мл, а межа виявлення  $0,236$  нг/мл. А для NDEA межа кількісного визначення становить  $0,483$  нг/мл, а межа виявлення  $0,159$  нг/мл.

Правильність характеризує ступінь відповідності отриманих результатів істинним значенням та є критичним показником валідації аналітичного методу. Для оцінки правильності використовували метод стандартних добавок, при якому до реальних зразків додавали відомі кількості NDMA та NDEA, а потім визначали їх вилучення (recovery, %). Критерієм прийнятності встановлено абсолютне відхилення ( $\delta$ ) від 100% не більше 20%. Числові показники подані в таблиці 1.

Таблиця 1.

Числові показники правильності

Зразки	Recovery (%)	Абсолютне відхилення ( $\delta$ )	Висновок
A(NDMA)	84,7%	15,3%	Відповідає
A(NDEA)	107,6%	7,6%	Відповідає
B(NDMA)	94,7%	5,3%	Відповідає
B(NDEA)	110,8%	10,8%	Відповідає

При цьому, у разі потреби, зменшити відхилення результатів можливе застосування методу стандартних добавок для кількісного визначення згаданих нітрозамінів, що є більш точним підходом, але водночас потребує часу для приготування більшої кількості проб порівняно з методом зовнішнього стандарту.

Збіжність є важливою характеристикою аналітичного методу, що відображає ступінь близькості результатів окремих визначень, виконаних за короткий проміжок часу в однакових умовах. Для оцінки збіжності використано результати дослідження правильності NDMA і NDEA, розраховані за показником відносного стандартного відхилення (RSD, %). Критерієм прийнятності встановлено RSD не більше 10%, що забезпечує достатню достовірність і відтворюваність аналітичних результатів. Результати наведено в табл. 2.

Таблиця 2.

Результати збіжності для зразка А та В

Параметр	Критерій прийнятності	Результат	Висновок
RSD, % NDMA (зразок А)	$\leq 10\%$	5,9%	Відповідає
RSD, % NDEA (зразок А)	$\leq 10\%$	6,5%	Відповідає
RSD, % NDMA (зразок В)	$\leq 10\%$	3,5%	Відповідає
RSD, % NDEA (зразок В)	$\leq 10\%$	5,2%	Відповідає

### Висновки

Розроблена аналітична методика для визначення NDMA та NDEA відповідає встановленим критеріям валідації за показниками лінійності, правильності та збіжності. Методика забезпечує точне та відтворюване визначення досліджуваних речовин у низьких концентраціях і може бути рекомендованою для практичного застосування у відповідних лабораторних дослідженнях.