

**КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА**

ХІМІЧНИЙ ФАКУЛЬТЕТ



Тези доповідей

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



КИЇВ, 13-14 травня 2026

Київський національний університет імені Тараса Шевченка

Хімічний факультет

ТЕЗИ ДОПОВІДЕЙ

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

BOOK OF ABSTRACTS

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

Київ, 13-14 травня 2026 р.

ОРГАНІЗАЦІЙНИЙ КОМІТЕТ КОНФЕРЕНЦІЇ

Голова оргкомітету – *Воловенко Юліан Михайлович*, д.х.н., професор, в.о. декана хімічного факультету

Співголови оргкомітету:

Куцевол Наталія Володимирівна, д.х.н., доцент, ст.н.с., в.о. заступника декана хімічного факультету;

Усенко Наталія Ігорівна, к.х.н., доцент, в.о. заступника декана хімічного факультету.

Члени оргкомітету:

Фрицький Ігор Олегович – д.х.н., професор, академік НАН України, завідувач кафедри фізичної хімії;

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

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

Тананайко Оксана Юріївна – д.х.н., професор, завідувач кафедри аналітичної хімії;

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

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

Відповідальні за функціонування секцій

Кафедра неорганічної хімії

Кучерів Оlesia Ільківна, PhD, асистент кафедри неорганічної хімії,

Виноградов Олександр Сергійович, PhD, завідувач навчальної лабораторії, м.н.с.

Кафедра фізичної хімії

Крейман Данило Сергійович, аспірант кафедри фізичної хімії,

Яковенко Олексій Михайлович, к.х.н., м.н.с.

Кафедра високомолекулярних сполук

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

Кафедра аналітичної хімії

Діюк Надія Віталіївна, аспірантка кафедри аналітичної хімії,

Лесик Дмитро Сергійович, аспірант кафедри аналітичної хімії.

Кафедра органічної хімії

Ващенко Богдан Вікторович, PhD, асистент кафедри органічної хімії.

АНАЛІТИЧНА ХІМІЯ

ЗАСТОСУВАННЯ МЕТОДІВ МАТЕМАТИЧНОГО МОДЕЛЮВАННЯ ДЛЯ ОПТИМІЗАЦІЇ ПАРАМЕТРІВ ВЕРХ ПРИ РОЗРОБЦІ МЕТОДИКИ

Гікал Г.О.¹, Сиротчук О.А.^{2,3}, Глушаченко О.О.¹

¹ Національний медичний університет ім. О.О. Богомольця,
01601, Київ, бульвар. Т. Шевченка, 13; H.Hleb@proton.me

² Інститут біологічної хімії імені Ф.Д. Овчаренка НАН України,
03142, Київ, бульв. Вернадського, 42; Syrotchuk@gmail.com,

³ Інститут геохімії, мінералогії та рудоутворення імені М.П. Семененка НАН України,
03142, Київ, просп. Палладіна, 34.

Актуальність: Вибір і оптимізація умов для високоефективної рідинної хроматографії традиційно базується на методи послідовних експериментів, що є часомістким і ресурсозатратним процесом і не дозволяє об'єктивно оцінити взаємозв'язок між усіма критичними параметрами системи. Використання інструментів математичного моделювання, зокрема методології поверхні відгуку (Response Surface Methodology, RSM), дає змогу перейти від емпіричного підбору до системного аналізу параметрів досліджуваних сполук. Застосування зазначеного підходу на прикладі розділення азилсартану медоксомілу та продукту його гідролізу демонструє можливість скорочення кількості експериментів та визначення оптимальної робочої області методу.

Мета роботи: Продемонструвати можливості використання програмного забезпечення DryLab з інтегрованими інструментами штучного інтелекту для побудови математичної моделі розділення азилсартану медоксомілу та продукту його гідролізу, а також визначити оптимальний склад рухомої фази для розробки методики кількісного визначення.

Методи дослідження: роботу виконано на рідинному хроматографі Agilent 1100 зі спектрофотометричним (СФ) детектором та хроматографічною колонкою Zorbax Phenyl 250 × 4.6 (5 мкм). Стандартна речовина азилсартану медоксомілу (ФСЗДФУ), етанол 96 % "УКРСПИРТ", вода для ВЕРХ отримано на установці Simplicity UV, Millipore, USA, ПЗ DryLab.

Результати: Для калібрування математичної моделі та побудови поверхні відгуку було підготовлено 12 варіантів рухомих фаз, що сформували експериментальну матрицю 3×4. Варіація критичних параметрів здійснювалася за наступною схемою:

1. Рівень рН амоній-ацетатного буфера: 2.0; 4.0 та 7.0.
2. Вміст етанолу (96%) у рухомій фазі: 50%, 60%, 70% та 80% (v/v).

Отримані хроматографічні дані для кожного з 12 варіантів були використані в ПЗ DryLab як вхідні дані для калібрування моделі. На основі цього набору даних виведено рівняння поліноміальної регресії другого порядку, яке описує залежність роздільної здатності $\ln(R_s)$ від рН та відсоткового вмісту етанолу:

$$\ln(R_s) = 3.354 + 0.979 \times \text{pH} - 0.0302 \times (\% \text{EtOH}) - 0.0891 \times \text{pH}^2 - 1.19 \times 10^{-5} \times (\% \text{EtOH})^2 - 4.69 \times 10^{-3} \times \text{pH} \times (\% \text{EtOH})$$

Аналіз отриманого рівняння дозволяє інтерпретувати вплив кожного параметру на ефективність розділення. Позитивний знак лінійного коефіцієнта при значенні рН (+0.979) вказує на те, що в початковому діапазоні підвищення рН сприяє зростанню роздільної здатності. Водночас від'ємний знак лінійного коефіцієнта при вмісті етанолу (-0.0302) відображає закономірність зворотньо фазової хроматографії, де збільшення частки органічного модифікатора знижує час утримування аналіту, що призводить до поступового зменшення R_s . Наявність у рівнянні як лінійного члена рН, так і його квадрата (pH^2) дозволяє моделі описувати не просто пряму залежність, а криволінійний характер процесу.

Описані математичні залежності знаходять своє візуальне підтвердження на побудованих графіках поверхні відгуку. На 3D-схемі (Рис. 1) відображено сукупний вплив обох факторів, де від’ємний квадратичний коефіцієнт рН формує характерний «купол» або пагорб. Вершина цього пагорба відповідає оптимальній робочій точці, де досягається максимальна роздільна здатність.

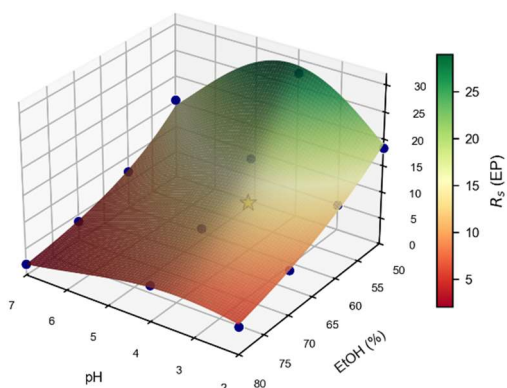


Рис. 1. 3D поверхня відгуку: вплив рН та вмісту етанолу на роздільну здатність

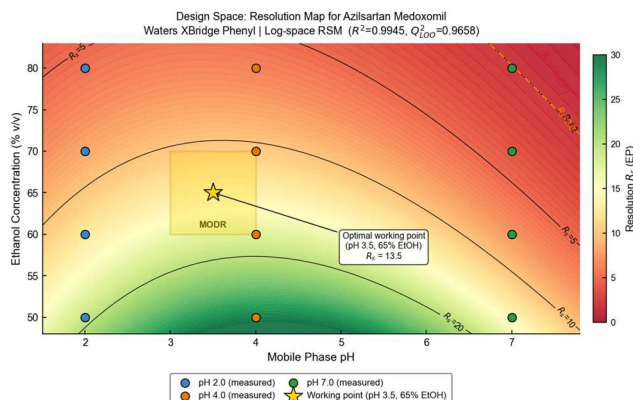


Рис. 2. 2D поверхня відгуку роздільної здатності (RSM-оптимізація)

Перехід до 2D-карти розділення (Рис. 2) дозволяє розглянути цю поверхню в проекції, що є важливим для оцінки робастності методу. На цій схемі позначено оптимальну точку (рН 3.5, 65% EtOH) з прогнозованим значенням $R_s \approx 13.54$. Жовтим прямокутником виділено область MODR (Method Operable Design Region) у діапазоні рН 3.0–4.0 та 60–70% етанолу.

Статистичну значущість побудованої моделі підтверджено за допомогою дисперсійного аналізу (ANOVA): для всіх основних факторів і їх взаємодій значення р-value становили $<0,001$, що свідчить про адекватність отриманого рівняння регресії та наявність статистично значущого впливу досліджуваних змінних. Прогноз робочої точки для обраного складу рухомої фази (рН 3.5 / 65% (v/v) EtOH) такий:

Параметр	Значення
Характер прогнозу	Інтерполяція (65% EtOH у межах дослідженого діапазону 50–80%)
Прогнозоване R_s (EP)	13.54 [95% ДІ: 10.98 – 16.69]
Прогнозований k (АФІ)	2.78 [95% ДІ: 1.80 – 4.29]
R^2 (модель R_s)	0.9945
Adj. R^2	0.9899
Q^2 (LOO-CV)	0.9658

Експериментально отримане значення роздільної здатності ($R_s = 11,70$) узгоджується з прогнозованим значенням моделі та знаходиться в межах 95% довірчого інтервалу, що вказує на прийнятну прогностичну здатність моделі в межах дослідженого простору. Фактор утримування (k) також було спрогнозовано з достатньою точністю: відхилення між експериментальним ($k = 2,85$) та розрахунковим значенням ($k = 2,78$) становило близько 2,5%, що свідчить про узгодженість моделі з експериментальними даними.

Висновки: Застосування методології поверхні відгуку дозволило побудувати математичну модель залежності роздільної здатності системи від рН та вмісту етанолу у рухомій фазі. Отримано рівняння, яке дозволяє оцінити вплив кожного фактору на розділення азилсартану медоксомілу та його продукту гідролізу. Узгодженість експериментальних та теоретичних значень роздільної здатності й фактора утримування в межах довірчих інтервалів підтверджує прогностичну здатність та адекватність отриманої моделі.