

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ



ХАРКІВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ
УНІВЕРСИТЕТ імені В. Н. КАРАЗІНА

ХІМІЧНИЙ ФАКУЛЬТЕТ



XV Всеукраїнська наукова
конференція студентів та аспірантів

ХІМІЧНІ КАРАЗІНСЬКІ ЧИТАННЯ – 2023

24–26 квітня 2023

ТЕЗИ ДОПОВІДЕЙ

Харків – 2023

Міністерство освіти і науки України
Харківський національний університет
імені В. Н. Каразіна
Хімічний факультет

XV Всеукраїнська наукова
конференція студентів та аспірантів
"Хімічні Каразінські читання - 2023"
(ХКЧ'23)

Тези доповідей

24–26 квітня 2023 року

Харків
2023

УДК 54 (063)
Х 46

Реєстраційне посвідчення у ДНУ «УкрІНТЕІ» МОН України (№ 621 від 22 грудня 2022 р.)

Затверджено до друку рішенням науково-методичної ради Харківського національного університету імені В.Н. Каразіна (протокол № 2 від 16.04.2023р.)

Тези доповідей представлені за теоретичними та практичними результатами наукових досліджень, виконаних студентами та аспірантами вищих навчальних закладів і науково-дослідницьких установ України.

Для науковців та студентів ВНЗ та НДІ України.

Тези доповідей подаються в авторській редакції.

ISBN 978-966-285-637-8

© Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна, 2023



ХІМІЧНИЙ ФАКУЛЬТЕТ

ХАРКІВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ
УНІВЕРСИТЕТ імені В. Н. КАРАЗІНА

УСНІ ДОПОВІДІ

Неорганічна хімія

Баран М.М., Ткаченко Т.В., Каменських Д.С., Бурдейний В.Г., Євдокименко В.О. Дослідження фазового складу промислового каталізатора синтезу метанолу до та після процесу гідрогенізації 15¹⁵ – 15³⁰

Махота Д.О., Проценко В.С., Бутиріна Т.Є. Електрокаталізатори на основі сплаву Ni-Cu, модифіковані шляхом анодної обробки в низькотемпературних евтектичних іонних рідинах 15³⁰ – 15⁴⁵

Назар А.П. Вплив умов кислотного модифікування природного флогопіту на активність каталізатора окисненням монооксиду карбону 15⁴⁵ – 16⁰⁰

Петросова Г.Р., Кучерів О.І., Фрицький І.О., Шова С., Гуральський І.О. Кубічні гібридні перовськіти з азиридиновим катіоном як перспективні напівпровідникові матеріали 16⁰⁰ – 16¹⁵

Семеніхін О.А., Кучерів О.І., Павленко В.О., Шова С., Гуральський І.О. Квантові точки на основі азиридинових перовськітів 16¹⁵ – 16³⁰

Сіренко В.Ю., Кучерів О.І., Шова С., Фрицький І.О., Гуральський І.О. Хіральні гібридні перовськіти на основі α -амінокислот як перспективні функціональні матеріали 16³⁰ – 16⁴⁵

Юрченко Ю.В., Корнієнко О.А., Замула М.В., Самелюк А.В., Оліфан О.І., Суббота І.С. Ізотермічний переріз діаграми стану трикомпонентної системи $ZrO_2-HfO_2-Nd_2O_3$ за температури 1100 °С 16⁴⁵ – 17⁰⁰

Аналітична хімія

Anokhin D. O., Panteleimonov A. V., Ivanov V. V. Linear regression models and the adequacy parameters for scattered data with outliers 15¹⁵ – 15³⁰

Шевчук В.В., Вельчинська О.В., Мелешко Р.А. Аналіз лікарських речовин ароматичної будови на присутність недопустимих домішок за допомогою методу ВЕРХ 15³⁰ – 15⁴⁵

Чернякова М.Ю., Беліков К.М., Буніна З.Ю. Нові глибокоевтектичні розчинники як екстрагенти елементних домішок свинцю 15⁴⁵ – 16⁰⁰

Статівко К. В., Юрченко О. І. Атомно-абсорбційне визначення концентрації свинцю та міді в сольових сумішах 16⁰⁰ – 16¹⁵

Жовновач А.М., Юрченко О. І. Вплив природи та концентрації ПАР на аналітичний сигнал при атомно-абсорбційному визначенні феруму та цинку в сольових сумішах 16¹⁵ – 16³⁰

Коржан Л.П., Титович В.В., Лелюшок С.О., Куліченко С.А. Смарт-кольорометричне визначення цетилпіридиній хлориду з бромтимоловим синім в присутності неіонної пар Triton X-100..... 16³⁰ – 16⁴⁵

Органічна хімія

Аксьонова М.В., Красножон Г.В., Литвин Р.З., Обушак М.Д. Молекулярний дизайн сполук типу донор-акцептор з фрагментами карбазолу та хінолін-2-ону 15¹⁵ – 15³⁰

Єфімов І.А., Новосад В.В., Дуда Д.М.І., Бутенко С.О. С₂-симетричні малеїніміди з флуорофорними фрагментами 15³⁰ – 15⁴⁵

Гринько В.І., Колос Н.М. Синтез та трансформація тетраіндол-4-онів з 2-ціаноацетамідним залишком в положенні 3 біциклу 15⁴⁵ – 16⁰⁰

Горбаточкін Ю.О., Тарасенко Д.О., Котляр В.М. Нові похідні (Е)- 4 -(4-хлоро-2- (диметиламіно) тіазол-5-іл) бут-3- ен-2-ону в реакціях циклізації..... 16⁰⁰ – 16¹⁵

Anokhin D. O., Ivanov V. V. Toward finding molecules with activity against Covid-19. Relationship of screening and docking results..... 16¹⁵ – 16³⁰

Olena Klenina, Yana Drapak, Ana Ramos, and Beatriz de Pascual-Teresa Applicability domain defining in QSAR modeling 16³⁰ – 16⁴⁵

Olena Klenina, Claire Coderch, Irene Ortín, José María Zapico, Laura Márquez Cantudo, Ana Ramos, and Beatriz de Pascual-Teresa. Conformational sampling necessity for multy-targeting inhibitors 16⁴⁵ – 17⁰⁰

Фізична хімія

Городниченко К. С., Христенко І.В. Дослідження впливу матриці на галохромні Властивості рН-чутливого барвника Нітразинового Жовтого 15¹⁵ – 15²⁵

Hrytsenko B. Y., Dudariiev D.S., Vovchinskyi I.S., Kalugin O. N. Transport properties and dynamic structure of SBPBF₄ / acetonitrile solutions: molecular dynamics simulation 15²⁵ – 15³⁵

Іванюхіна А.С., Волканова А.О. Дослідження полярності бінарних систем гліцерину з етилендіаміном та етаноламіном методом сольватохромних проб 15³⁵ – 15⁴⁵

- Іноземцев Д.М., В'юник І.М., Булавін В.І. Вплив однозарядних іонів на трансляційний рух молекул у мурашиній кислоті при 298.15К. 15⁴⁵ – 15⁵⁵
- Піскунов І.І., Коверга В., Калугін О.М. Нековалентні взаємодії у бінарних сумішах BMIMTFSI з тетрагідрофураном в рамках явної сольватаційної моделі..... 15⁵⁵ – 16¹⁰
- Popirny M.A., Kriklya (Kamneva) N.N., Gorobchenko O.A. Nonlinear behaviour of water and fractal aggregate structures under dehydration self-organization of humic solutions isolated from soil..... 16¹⁰ – 16²⁰
- Prud M., Kyrychenko A., Prymak O., Epple M., Kalugin O. pH-dependent structure of glutathione-functionalized small gold nanoparticles: molecular dynamics simulation study..... 16²⁰ – 16³⁰
- Сведюк О.С., Христенко І.В., Іванов В.В. Сольватохромія барвників: нільський червоний та нільський блакитний. Теорія і експеримент 16³⁰ – 16⁴⁰
- Федоренко М. А., Токарев В. В. Класифікація термодинамічних властивостей S=1 одномолекулярних магнетиків з одноіонною анізотропією 16⁴⁰ – 16⁵⁰
- Filatov Ya. I., Jedlovszky P., Idrissi A., Kalugin O. N. A Thermodynamics of mixing of [BMIM][PF₆] with acetonitrile as seen from monte carlo simulations 16⁵⁰ – 17⁰⁰

ЗМІСТ

Неорганічна хімія

<i>Баран М. М., Ткаченко Т. В., Каменських Д. С., Бурдейний В. Г., Євдокименко В. О.</i> Дослідження фазового складу промислового каталізатора синтезу метанолу до та після процесу гідрогенізації.....	16
<i>Березнюк О. П., Алрікік М., Піскач Л. В.</i> Фізико-хімічна взаємодія між $A^I_3C^VX_3$ та сполуками в системах $A^I_2S - C^V_2S_3 - B^{IV}S_2$, де $A^I=Cu, Ag$; $C^V=As, Sb$; $B^{IV}=Ge, Sn$	18
<i>Довжик А. А., Виноградов О. С., Давиденко Ю. М., Павленко В. О.</i> Синтез біядерного комплексу купруму(II) з 3,5-диметил-1H-піразолом методом окисного розчинення.....	20
<i>Картишев С. В.</i> Дослідження будови систем $ZnO-Al_2O_3-TiO_2 (SnO_2)-SiO_2$ як основи для створення антибактеріальних покриттів для керамограніту і порцелянових плит.....	21
<i>Кожухова М. М., Оксютович О. А., Кусяк Н. В.</i> Імобілізація альбуміну на наночастинках магнетиту.....	24
<i>Бітюцька В. В., Козло Д. О., Фесенко О. І., Саввова О. В.</i> Неорганічні матеріали для тканинної інженерії.....	25
<i>Корекян П. Ю., Тараненкова В. В.</i> Фазовий склад продуктів гідратації доломітового в'язучого.....	27
<i>Лавриненко О. М., Павленко О. Ю., Оліфан О. І.</i> Вплив природи вихідних сполук на формування нанорозмірних структур ортоферитів ітрію і лантану.....	28
<i>Махота Д. О., Проценко В. С., Бутиріна Т. Є.</i> Електрокаталізатори на основі сплаву Ni-Cu, модифіковані шляхом анодної обробки в низькотемпературних евтектичних іонних рідинах.....	30
<i>Назар А. П.</i> Вплив умов кислотного модифікування природного флогопіту на активність каталізатора окиснення монооксиду карбону.....	32
<i>Панасюк Н. В., Смітюх О. В., Марчук О. В., Федорчук А. О.</i> Особливості структури твердого розчину $Cu_2CoSn_{1-x}Si_xS_4$	34
<i>Панченко Т. В., Пінчук К. А., Камінський О. М.</i> ЗГА – синтез нікелевого нанофериту.....	36
<i>Петросова Г. Р., Кучерів О. І., Фрицький І. О., Шова С., Гуральський І. О.</i> Кубічні гібридні перовськіти з азиридиновим катіоном як перспективні напівпровідникові матеріали.....	38
<i>Покроєва Я. О., Лобань Л. С., Саввова О. В., Ісиченко А. В.</i> Вплив структури порцеляни та керамограніту на їх фізико-хімічні властивості.....	40
<i>Романюк А. Д., Ненастіна Т. О., Проскуріна В. О.</i> Підвищення стійкості розчинів електrolітів на основі Fe^{2+}	42
<i>Семеніхн О. А., Кучерів О. І., Павленко В. О., Шова С., Гуральський І. О.</i> Квантові точки на основі азиридинових перовськітів.....	44

<u>Сіренко В. Ю., Кучерів О. І., Шова С., Фрицький І. О., Гуральський І. О.</u> Хіральні гібридні перовськіти на основі α -амінокислот як перспективні функціональні матеріали	46
<u>Старко І. Ю., Татарчук Т. Р.</u> Синтез, структура та морфологія нікель-кобальтових феритів, допованих іонами гадолінію.....	48
<u>Тараненко А. С., Трус І. М., Твердохліб М. М., Галиш В. В., Гомеля М. Д.</u> Розробка методів утилізації осадів утворених при знезалізненні води.....	49
<u>Тур О. Г., Савцова О. В., Русанов О. В.</u> Перспективність синтезу шпінельвмісних склокристалічних матеріалів для імпульсної дальнометрії.....	51
<u>Федіна Б. В., Жданюк Н. В.</u> Синтез безсвинцевих емалей художнього і ювелірного призначення.....	53
<u>Федосова Н., Третьякова І., Довбій Я., Денисенко І., Александру Ротару, Ковальська В., Черній В.</u> Фталоціанінові комплекси цирконію та гафнію з позаплощинно координованим стирилціаніновим лігандом, синтез та спектральні властивості.....	55
<u>Філіпова П. В., Антрапцева Н. М., Домницький О. В.</u> Термоаналітичні дослідження гідратованих цинку-магнію фосфатів	57
<u>Чиж Б. М., Блашко Н. М., Марчук О. В., Смітюх О. В., Федорчук А. О.</u> Кристалічна структура $Pb_3-Ce_3Pb_{0,1}Ga_{1,6}S_7$	58
<u>Юрченко Ю. В., Корнієнко О. А., Замула М. В., Самелюк А. В., Оліфан О. І., Суббота І. С.</u> Ізотермічний переріз діаграми стану трикомпонентної системи $ZrO_2-HfO_2-Nd_2O_3$ за температури 1100 °С	60

Аналітична хімія

<u>Anokhin D. O. , Panteleimonov A. V. , Ivanov V. V.</u> Linear regression models and the adequacy parameters for scattered data with outliers.....	63
<u>Гавронська М. О., Лужна С. А., Король Н. С., Ридчук П. В., Остап'юк Ю. В.</u> Фотометричне визначення кобальту(II) з використанням 1-(1-метил-1H-піразол-3-іл-азо)-нафтален-2-олу.....	65
<u>Галка Л. М., Поліщук О. Р., Кучер Т. В., Криськів Л. С., Поляк О. Б., Логойда Л. С.</u> Розробка спектрофотометричної методики визначення розувастатину в таблетках за реакцією з бромкрезоловим пурпуровим.....	66
<u>Горин М. М., Тифонюк Ю. В., Логойда Л. С.</u> Експериментальні підходи до вибору реагенту для спектрофотометричної методики визначення мельдонію в лікарських засобах	68
<u>Єрмоменко М. В., Леонова Н. О.</u> Атестація вторинного стандартного зразку парацетамолу для використання у кількісному визначенні методом ВЕРХ у фармацевтичних препаратах	70
<u>Жовновач А. М., Юрченко О. І.</u> Вплив природи та концентрації ПАР на аналітичний сигнал при атомно-абсорбційному визначенні феруму та цинку в сольових сумішах.....	72

<i>Коржан Л. П., Титович В. В., Лелюшок С. О., Куліченко С. А.</i> Смарт-кольорометричне визначення цетилпіридиній хлориду з бромтимоловим синім в присутності неіонної ПАР Triton X-100.....	74
<i>Крашеніна В. С., Петруша Ю. Ю.</i> Актуальність вивчення фізико-хімічних параметрів якості таблеток кальцій глюконату	76
<i>Кулинич А. І., Уколова М. В., Іванова А. О., Ридчук П. В., Остап'юк Ю. В.</i> Комплекси нікелю(II) з 1-(1-метил-1Н-піразол-3-іл-азо)-нафтален-2-олом – нові аналітичні форми в екстракційно-фотометричному аналізі.....	78
<i>Петренко В. С., Кловак В. О.</i> Визначення білку з використанням ПАР-модифікованої системи Мо(VI) – бромпірогалоловий червоний методами молекулярної спектроскопії	79
<i>Салій О. О., Бессарабов В. І., Первун Ю. В.</i> Валідація спектрофотометричної методики визначення розчинення діацереїну з твердих желатинових капсул в ацетатному буферному розчині	80
<i>Статівко К. В., Юрченко О. І.</i> Атомно-абсорбційне визначення концентрації свинцю та міді в сольових сумішах	82
<i>Туплинська К. В., Логойда Л. С.</i> Валідація методики контролю якості таблеток Раміприлу за показником «розчинення».....	84
<i>Чернякова М. Ю., Беліков К. М., Буніна З. Ю.</i> Нові глибокоектєктивні розчинники як екстрагенти елементних домішок свинцю	86
<i>Шевчук В. В., Вельчинська О. В., Мелешко Р. А.</i> Аналіз лікарських речовин ароматичної будови на присутність недопустимих домішок за допомогою методу ВЕРХ	87

Органічна хімія

<i>Anokhin D. O., Ivanov V. V.</i> Toward finding molecules with activity against COVID-19. relationship of screening and docking results	90
<i>Karaush-Karmazin N., Baryshnikov G., Minaeva V., Minaev B.</i> Tetraoxa[8]circulene-based organic oligomers: from quantum-chemical prediction to synthesis	92
<i>Olena Klenina, Yana Drapak, Ana Ramos, Beatriz de Pascual-Teresa</i> Applicability domain defining in QSAR modeling	94
<i>Olena Klenina, Claire Coderch, Irene Ortín, José María Zapico, Laura Márquez Cantudo, Ana Ramos, and Beatriz de Pascual-Teresa</i> Conformational sampling necessity for multy-targeting inhibitors	97
<i>Oksiuta O. V., Filatov Ya. I., Volochnyuk D. M.</i> Calculations and analysis of ¹⁹ F NMR spectra for the instrumental determination of biologically active compounds in a competitive environment	99
<i>Severin O. O., Pilyo S. G., Kachaeva M. V., Brovarets V. S.</i> Synthesis and study of antitumor activity of N-(4-cyano-1,3-oxazol-5-yl)-N-alkylsulfonamides.....	101

АНАЛІЗ ЛІКАРСЬКИХ РЕЧОВИН АРОМАТИЧНОЇ БУДОВИ НА ПРИСУТНІСТЬ НЕДОПУСТИМИХ ДОМІШОК ЗА ДОПОМОГОЮ МЕТОДУ ВЕРХ

Шевчук В. В., Вельчинська О. В., Мелешко Р. А.

Національний медичний університет імені О. О. Богомольця

v.v.shevchuk01@gmail.com

Серед найбільш популярних фармацевтичних композицій з речовинами ароматичної будови можна виділити (*RS*)-2-(4-ізобутилфеніл)-пропіонову кислоту (ібупрофен, речовина А) та *N*-(4-гідроксифеніл)-ацетамід (парацетамол, речовина В) [1,2].

Варіабельність вихідних ароматичних молекул ізобутилбензену та фенолу на основі введення до їх хімічної структури фармакофорних угруповань призвела до синтезу поліфункціональних молекул *N*-(4-гідроксифеніл)-ацетаміду та (*RS*)-2-(4-ізобутилфеніл)-пропіонової кислоти, рис. 1.

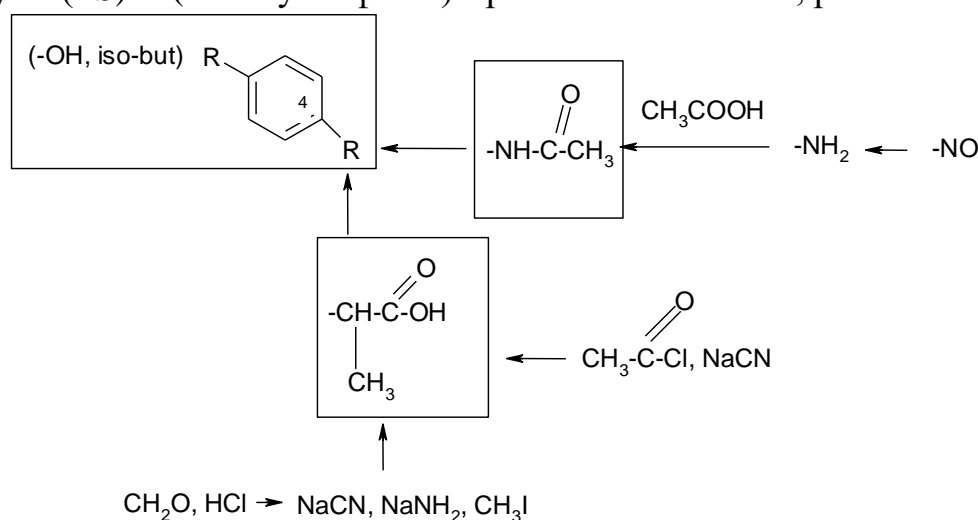


Рис. 1. Варіабельність ароматичних молекул (бензен, фенол)

Згідно вимог ДФУ, Ph. Eur. та ВР, допустимі та недопустимі домішки в субстанціях А та В визначають РХ [3, 4].

Метою дослідження є розробка та відпрацювання методики визначення в зразках субстанцій допустимих та недопустимих домішок методом HPLC.

Для проведення інструментальних досліджень використовували хроматограф Agilent 1260 Infinity II з УФ детектором, колонка (t° 25°C) – ZORBAX Eclipse Plus C18, 150x4,6x3,5; (*ібупрофен, субст.*): потік – 1,2 мл/хв, детектування 214 нм, об'єм інжекції – 20 мкл; (*парацетамол, субст.*): потік – 0,42 мл/хв, детектування 245 нм, об'єм інжекції – 10 мкл.

За результатами аналізу субстанцій ВЕРХ встановлено: субстанція *N*-(4-гідроксифеніл)-ацетаміду містить недопустимі домішки *D* (R_t 17.149 хв (imp 1)), *E* (R_t 20.375 хв (imp 2)), *H* (R_t 30.729 хв (imp 3)), домішку ібупрофену (R_t 55.935 хв (imp ібупрофен)); субстанція (*RS*)-2-(4-ізобутилфеніл)-пропіонової

кислоти містить супутні домішки N, O, B та суму невідомих домішок (R_t 30.533 хв (imp N), 40.037 хв (imp 1), 45.982 хв (imp O), 48.949 хв (imp B)), рис. 2, 3.

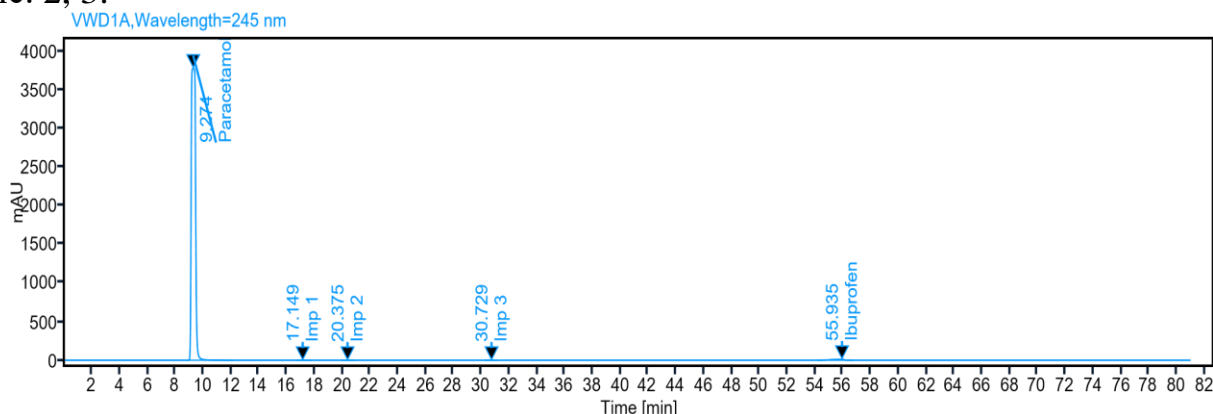


Рис. 2. Хроматограма зразку субстанції *N*-(4-гідроксифеніл)-ацетаміду (R_t 9.274 хв) з ідентифікованими та не ідентифікованими домішками (imp 1, 2, 3, ibuprofen)

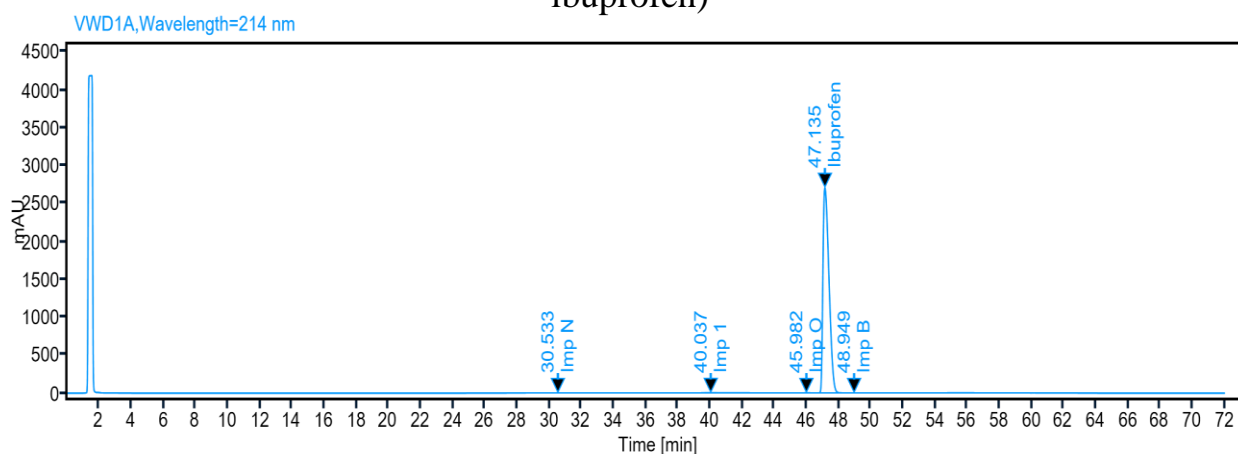


Рис. 3. Хроматограма зразку субстанції *(RS)*-2-(4-ізобутилфеніл)-пропіонова кислота (R_t 47.135 хв) з ідентифікованими та не ідентифікованими домішками (imp 1, N, O, B)

Метод ВЕРХ має значні переваги у порівнянні з іншими інструментальними методами, які залишають неможливим аналіз деяких домішок в лікарських речовинах.

- [1] Acetaminophen – Compound Summary. PubChem. The National Library of Medicine, 2011.
- [2] Hughes, J. Pain Management: From Basics to Clinical Practice. Elsevier Health Sciences, 2008:320.
- [3] British Pharmacopoeia 2020. London.2020:I-1298.www.webofpharma.com.
- [4] Paracetamol monograph draft (PA/PH/EXP. 10A/T (19) 136 ANP published in Pharmeuropa 32/1 (01/2020).