

ВИЗНАЧЕННЯ ВМІСТУ ФОСФАТ ЙОНІВ У ПРИРОДНІЙ ВОДІ

Природна вода – предмет постійної уваги, оскільки вона визначає якість життя людей та біорізноманіття. При проведенні моніторингу води визначається низка показників органолептичні (смак, запах, прозорість, кольоровість), фізико-хімічні (рН, жорсткість, окиснюваність, вміст певних іонів, зокрема хлоридів, нітратів та ін.) і біологічні. Одним з фізико-хімічних показників, до якого останнім часом прикута особлива увага екологів, є концентрація фосфат іонів. Це пов'язано з тим, що накопичення фосфат іонів у природній воді може сприяти бурхливому розростанню водних рослин, зокрема синьо-зелених водоростей, що призводить до зниження концентрації розчиненого кисню у воді, загибелі риби та інших гідробіонтів. З надлишком зазначених іонів пов'язане явище евтрофікації – цвітіння води.

Мета роботи – визначити вміст фосфат іонів у зразках природної води відібраних на території Ічнянського національного природного парку.

Метод дослідження – фотоколориметричний з використанням амоній молібдату [1]. Одержані дані представлені в таблиці, і свідчать про відсутність перевищення нормованого показника (3,5 мг/дм³), затвердженого Міністерством захисту довкілля та природних ресурсів України (Наказ №173 від 05.03.2021 р.).

Таблиця. Концентрація фосфат йонів у зразках природної води

№ зразка	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
C(PO ₄ ³⁻), мг/дм ³	0,32	1,37	0,53	3,37	1,90	1,90	1,58	2,95	0,21	2,07	3,17

В той же час, одержані значення для різних зразків води з гідрологічних об'єктів парку вказують на актуальність постійного моніторингу якості води.

Список використаних джерел

1. Стрижак С. В. Фотоколориметричні методи аналізу: навчальний посібник. Полтава: ПНПУ імені В. Г. Короленка, 2023. 31 с.

Карасьова В. І., Бондар О. С.

КВАНТОВО-ХІМІЧНІ ДЕСКРИПТОРИ ТА ЇХ ЗАСТОСУВАННЯ У ПРОГНОЗУВАННІ БІОЛОГІЧНОЇ АКТИВНОСТІ ВТОРИННИХ АМІНІВ З ЦИКЛІЧНИМИ ЗАМІСНИКАМИ

Гетероциклічні сполуки є важливими об'єктами наукових досліджень, та привертають значну увагу завдяки своїй високій біологічній активності, яка зумовлює їх широке застосування для створення фармакологічних препаратів. Особливий науковий інтерес становлять похідні з триазольним і азепінієвим фрагментами, що характеризуються протисудомною, анксиолітичною, анальгезуючою та протизапальною дією [1], тож є перспективними для досліджень у фармацевтичній хімії.

Мета роботи: пошук кореляційних залежностей між біологічною активністю та квантово-хімічними характеристиками молекул вторинних амінів з циклічними замісниками.

У роботі було досліджено N-арил-N-(6,7,8,9-тетрагідро-5H-[1,2,4]триазоло[4,3-а]азепін-3-ілметил)-аміни, з різними замісниками у фенільному фрагменті: без замісника (сполука 1), -CH₃ (сполука 2), -OCH₃ (сполука 3), -F (сполука 4), -Cl (сполука 5), -I (сполука 6). Речовини синтезовано та надано для дослідження співробітником ТОВ НВП «Укроргсинтез» Макеєм О.П.

Розрахунок квантово-хімічних параметрів проведено у програмі Chem3D (ChemOffice), а саме: розподіл зарядів на атомах, енергія вищої зайнятої молекулярної орбіталі (E_{HOMO}) та енергія нижньої вакантної молекулярної орбіталі (E_{LUMO}). Прогнозування ймовірної біологічної активності здійснено у веб-сервісі SuperPred. Кореляційний та регресійний аналіз проводився у Microsoft Excel.