

Волинський національний університет  
імені Лесі Українки

# **ПРОБЛЕМИ ХІМІЇ ТА СТАЛОГО РОЗВИТКУ**

Випуск 4



Видавничий дім  
«Гельветика»  
2025

## РЕДАКЦІЙНА КОЛЕГІЯ:

**Марушко Лариса Петрівна** – доктор педагогічних наук, доцент, декан факультету хімії та екології Волинського національного університету імені Лесі Українки (головний редактор);

**Анічкіна Олена Василівна** – кандидат педагогічних наук, доцент, завідувач кафедри хімії Житомирського державного університету імені Івана Франка;

**Бедункова Ольга Олександрівна** – доктор біологічних наук (03.00.16 – Екологія), доцент, професор кафедри екології, технології захисту навколишнього середовища та лісового господарства Національного університету водного господарства та природокористування;

**Боярин Марія Володимирівна** – кандидат географічних наук, доцент, доцент кафедри екології та охорони навколишнього середовища Волинського національного університету імені Лесі Українки;

**Гулай Любомир Дмитрович** – доктор хімічних наук, професор, завідувач кафедри неорганічної та фізичної хімії Волинського національного університету імені Лесі Українки;

**Гулай Ольга Іванівна** – доктор педагогічних наук, професор, професор кафедри цифрових освітніх технологій та кафедри харчових технологій та хімії Луцького національного технічного університету;

**Казаків Наталія Вікторівна** – кандидат педагогічних наук, доцент, доцент кафедри педагогіки Хмельницької гуманітарно-педагогічної академії;

**Калаур Світлана Миколаївна** – доктор педагогічних наук, професор, професор кафедри соціальної роботи та менеджменту соціокультурної діяльності, керівник Центру післядипломної освіти Тернопільського національного педагогічного університету імені Володимира Гнатюка;

**Караїм Ольга Анатоліївна** – кандидат економічних наук, доцент, доцент кафедри екології та охорони навколишнього середовища Волинського національного університету імені Лесі Українки;

**Клименко Олександр Миколайович** – доктор сільськогосподарських наук (03.00.16 – Екологія), професор, професор кафедри екології, технології захисту навколишнього середовища та лісового господарства Національного університету водного господарства та природокористування;

**Когут Юрій Миколайович** – кандидат хімічних наук, старший викладач кафедри неорганічної та фізичної хімії Волинського національного університету імені Лесі Українки;

**Лукашук Микола Миколайович** – кандидат педагогічних наук, викладач з предметів хімія і біологія Комунального закладу вищої освіти «Рівненська медична академія» Рівненської обласної ради;

**Марчук Олег Васильович** – доктор хімічних наук, професор, професор кафедри неорганічної та фізичної хімії Волинського національного університету імені Лесі Українки;

**Піскач Людмила Василівна** – кандидат хімічних наук, професор, професор кафедри неорганічної та фізичної хімії Волинського національного університету імені Лесі Українки;

**Романишина Оксана Ярославівна** – доктор педагогічних наук, професор, професор кафедри інформатики та методики навчання Тернопільського національного педагогічного університету імені Володимира Гнатюка;

**Романюк Ярослав Євгенійович** – PhD, керівник наукової групи Швейцарської федеральної лабораторії матеріалознавства і технологій (EMPA) (Швейцарія);

**Савицька Вікторія Василівна** – кандидат педагогічних наук, старший викладач кафедри освітології і педагогіки Західноукраїнського національного університету

**Саліва Леся Миколаївна** – кандидат хімічних наук, доцент кафедри органічної та фармацевтичної хімії Волинського національного університету імені Лесі Українки;

**Сливка Наталія Юрївна** – доктор хімічних наук, доцент, завідувач кафедри органічної та фармацевтичної хімії Волинського національного університету імені Лесі Українки;

**Смітюх Олександр Вікторович** – кандидат хімічних наук, старший викладач кафедри неорганічної та фізичної хімії Волинського національного університету імені Лесі Українки;

**Сонько Сергій Петрович** – доктор географічних наук (08.00.06 – Економіка природо-користування та охорони навколишнього середовища), професор, завідувач кафедри екології та безпеки життєдіяльності Уманського національного університету садівництва.

**Стучинська Наталія Василівна** – доктор педагогічних наук, кандидат фізико-математичних наук, професор, професор кафедри медичної і біологічної фізики та інформатики Національного медичного університету ім. О.О. Богомольця.

**Тюріна Валентина Олександрівна** – доктор педагогічних наук, професор, професор кафедри соціології та психології Харківського національного університету внутрішніх справ.

Журнал ухвалено до друку Вченою радою  
Волинського національного університету імені Лесі Українки  
**29 грудня 2025 р., протокол № 16**

Науковий журнал «Проблеми хімії та сталого розвитку» зареєстровано Національною радою України  
з питань телебачення і радіомовлення (Рішення № 1834 від 21.12.2023 року. Ідентифікатор медіа: R30-02341)

Суб'єкт у сфері друкованих медіа – Волинський національний університет імені Лесі Українки  
(просп. Волі, буд. 13, м. Луцьк Волинської обл., 43025, post@vnu.edu.ua, тел. (0332) 720123).

Періодичність: 4 рази на рік.

«Проблеми хімії та сталого розвитку» включено до Переліку наукових фахових видань України категорії Б  
у галузі знань природничі науки (спеціальності Е2 – Екологія; Е3 – Хімія),  
педагогічні науки А1 – Освітні, педагогічні науки; А5 – Професійна освіта (за спеціалізаціями))  
відповідно до Наказу МОН України № 735 від 29 червня 2021 року (додаток 4),  
Наказу МОН України № 1166 від 23 грудня 2022 року (додаток 3)

Офіційний сайт видання: [www.journals.vnu.volyn.ua/index.php/chemistry](http://www.journals.vnu.volyn.ua/index.php/chemistry)

Статті у виданні перевірені на наявність плагіату за допомогою програмного забезпечення StrikePlagiarism.com  
від польської компанії Plagiat.pl.

ISSN 2786-4669 (Print)  
ISSN 2786-4677 (Online)

© Волинський національний університет імені Лесі Українки, 2025

## ХІМІЯ

УДК 502.51(26):504.5:574.5]:556.114(477.7)

DOI <https://doi.org/10.32782/pcsd-2025-4-1>

### **Вікторія ГЕНЧЕВА**

кандидат біологічних наук, доцент кафедри хімії, Запорізький національний університет, вул. Університетська, 66, м. Запоріжжя, Україна, 69011

**ORCID:** 0000-0002-8764-4559

**Scopus Author ID:** 55971186700

### **Софія КАНАРОВА**

здобувач вищої освіти, Запорізький національний університет, вул. Університетська, 66, м. Запоріжжя, Україна, 69011

**Бібліографічний опис статті:** Генчева, В., Канарова, С. (2025). Оцінка забруднення морської води стійкими органічними поліютантами північно-західної частини Чорного моря. *Проблеми хімії та сталого розвитку*, 4, 3–9, doi: <https://doi.org/10.32782/pcsd-2025-4-1>

## **ОЦІНКА ЗАБРУДНЕННЯ МОРСЬКОЇ ВОДИ СТІЙКИМИ ОРГАНІЧНИМИ ПОЛІУТАНТАМИ ПІВНІЧНО-ЗАХІДНОЇ ЧАСТИНИ ЧОРНОГО МОРЯ**

Прибережна зона північно-західної частини Чорного моря зазнає значного впливу різних видів антропогенної діяльності та індустріального розвитку, що викликає занепокоєння щодо можливого забруднення морської води. У зв'язку з цим особливої актуальності набувають дослідження, спрямовані на визначення рівнів стійких органічних забруднювачів, які здатні тривалий час зберігатися у воді, акумулюватися в донних відкладах і чинити токсичний вплив на водні екосистеми. Метою цього дослідження було оцінити рівні забруднення хлорорганічними пестицидами, поліхлорованими біфенілами та поліциклічними ароматичними вуглеводнями у прибережних водах м. Одеси шляхом відбору проб у трьох точках: пляж Аркадія, мис Малий Фонтан та Чорноморський яхт-клуб. Окрім визначення концентрацій органічних забруднювачів, були виміряні ключові фізико-хімічні параметри, такі як температура (°C), рН, солоність та вміст розчиненого кисню, щоб комплексно охарактеризувати якість води у цих районах. Оцінку потенційного екологічного ризику, пов'язаного зі вмістом стійких органічних забруднювачів (СОЗ), здійснювали із застосуванням коефіцієнта забруднення (Кз). Наукова новизна роботи полягає у комплексному поєднанні гідрохімічного аналізу з визначенням широкого спектра СОЗ у конкретних ділянках узбережжя, а також у паралельному врахуванні фізико-хімічних характеристик, що дозволило отримати багатofакторне уявлення про стан водного середовища та взаємозв'язки між умовами середовища і вмістом органічних поліютантів. Отримані дані показали, що фізико-хімічні параметри та концентрації СОЗ у більшості зон були близькими за значеннями і відповідали доброму та задовільному стану водного середовища. Незважаючи на це, регулярний моніторинг є необхідним для оцінки антропогенного впливу на екосистему та слугує важливим індикатором забруднення прибережних вод.

**Ключові слова:** гідрохімічний аналіз, стійкі органічні забруднюючі речовини, фізико-хімічні показники, Чорне море.

### **Viktorii GENCHEVA**

Candidate of Biological Sciences, Associate Professor at the Department of Chemistry, Zaporizhia National University, 66 Universytetska str., Zaporizhia, Ukraine, 69011

**ORCID:** 0000-0002-8764-4559

**Scopus Author ID:** 55971186700

### **Sofia KANAROVA**

Higher Education Student, Zaporizhia National University, 66 Universytetska str., Zaporizhia, Ukraine, 69011

**To cite this article:** Gencheva, V., Kanarova, S. (2021). Otsinka zabrudnennia morskoi vody stiikymy orhanichnymy poliutantamy pivnichno-zakhidnoi chastyny Chornoho moria [Assessment of marine water contamination by persistent organic pollutants in the northwestern part of the Black Sea]. *Problems of Chemistry and Sustainable Development*, 4, 3–9, doi: <https://doi.org/10.32782/pcsd-2025-4-1>

## ASSESSMENT OF MARINE WATER CONTAMINATION BY PERSISTENT ORGANIC POLLUTANTS IN THE NORTHWESTERN PART OF THE BLACK SEA

*The coastal zone of the northwestern part of the Black Sea is subject to significant pressure from various types of anthropogenic activities and industrial development, raising concerns regarding potential marine water contamination. In this context, studies aimed at determining the levels of persistent organic pollutants (POPs), which can remain in water for prolonged periods, accumulate in sediments, and exert toxic effects on aquatic ecosystems, are particularly relevant. The aim of this study was to assess the contamination levels of organochlorine pesticides, polychlorinated biphenyls, and polycyclic aromatic hydrocarbons in the coastal waters of Odesa by collecting samples at three sites: Arkadia Beach, Malyi Fontan Cape, and the Black Sea Yacht Club. In addition to determining the concentrations of organic pollutants, key physicochemical parameters, such as temperature (°C), pH, salinity, and dissolved oxygen content, were measured to provide a comprehensive assessment of water quality in these areas. The potential ecological risk associated with the presence of POPs was evaluated using the pollution coefficient (Kp). The scientific novelty of the study lies in the integrated combination of hydrochemical analysis with the determination of a wide range of POPs in specific coastal locations, alongside the parallel consideration of physicochemical parameters. This approach enabled a multifaceted understanding of the aquatic environment and the identification of relationships between environmental conditions and the concentrations of organic pollutants. The results showed that physicochemical parameters and POP concentrations were similar across most sites, corresponding to good or satisfactory water quality. Nevertheless, even low levels of persistent organic pollutants underscore the need for regular monitoring, which serves as a crucial indicator of anthropogenic impact and enables the timely detection of trends in coastal water quality deterioration.*

**Keywords:** hydrochemical analysis, persistent organic pollutants, physicochemical parameters, Black Sea.

**Вступ.** Наявність та біоаккумуляція забруднювачів Чорного моря становить загрозу для водного середовища та здоров'я людини. Стійкі органічні забруднюючі речовини (СОЗ), до яких належать хлорорганічні пестициди (ХОП), поліхлоровані біфеніли (ПХБ), та поліциклічні ароматичні вуглеводні (ПАВ), визнані однією з найбільш проблемних груп антропогенних хімічних речовин протягом останніх кількох десятиліть. Незважаючи на те, що численні країни протягом багатьох років припинили зареєстроване використання СОЗ, ці техногенні хімічні речовини все ще зберігаються на значних рівнях у всьому світі. Через свої токсичні, мутагенні та канцерогенні властивості ці стійкі сполуки вважаються небезпечними для біоти та навколишнього середовища (Chidewe L et al., 2025).

**Аналіз літератури.** Питанням оцінки якості морських вод північно-західної частини Чорного моря (ПЗЧМ) присвячено багато робіт (наукових статей, монографій, звітів тощо), які орієнтовані на аналіз розподілу гідрологічних та гідрохімічних показників якості морських вод ПЗЧМ за багаторічний період та оцінку впливу берегових джерел забруднення на якість морських вод (Тітяпкін А. С., 2024, Деньга Ю. М., 2020, Олейнік Ю. В., 2022)

**Метою роботи** є здійснення гідрохімічної оцінки поверхневих вод північно-західної частини Чорного моря за джерелами антропогенного впливу.

**Виклад основного матеріалу дослідження.** Північно-західна частина Чорного моря (ПЗЧМ) – це мілководний шельфовий район, гідролого-гідрохімічний режим якого значною мірою визначається річковим стоком. Від річкового стоку залежить розподіл гідролого-гідрохімічних характеристик поверхневих вод та термохалінна стратифікація. Північно-західний сектор підлягає скидам з річок Дунай, Дніпро та Дністер. Річка Дунай доставляє близько половини алохтонного матеріалу до Чорного моря, тому західна частина Чорного моря отримує більше теригенного матеріалу, ніж східна (Readman J. W et al., 2002). Окрім річкового стоку, забруднення морської акваторії відбувається через промислові, сільськогосподарські та муніципальні стічні води, атмосферні опади, а також діяльність портів, видобуток і транспортування нафти на морському шельфі.

Стійкість забруднювачів, значною мірою визначається їхньою хімічною структурою. Зокрема заміщенню атомів Н у біфенільних кільцях атомами Сl та посиленням зв'язкам

C=X, спричиненим спряженням між електронами однієї пари та розвиненими  $\pi$ -зв'язками, ПХБ дуже стійкі до кислот, лугів та окиснювачів. Хімічна стабільність багатьох представників хлорорганічної групи (або їхніх безпосередніх і часто токсичних метаболітів) також є значною, оскільки їхні молекули побудовані переважно зі зв'язків C—C, C—H і C—Cl, які зазвичай хімічно малоактивні за нормальних умов довкілля (El Nemr A et al., 2016, Malhat F et al., 2018). ПАВ характеризуються стійкістю завдяки конденсованим ароматичним кільцям із сильною  $\pi$ -кон'югацією. Шістнадцять пріоритетних видів ПАВ з низькою молекулярною масою (2–3-кільцеві ПАВ) зазвичай існують як у розчиненому, так і у вигляді твердих частинок, тоді як ті, що мають високу молекулярну масу (4–6-кільцеві ПАВ), як правило, мають меншу леткість і адсорбуються на поверхню частинок, пов'язаних з органічним вмістом твердофазної матриці, і можуть осідати в нижніх осадових породах (Zhang L. et al., 2020).

Їх просторовий розподіл залежить від океанічних процесів, наприклад, їх поверхневі концентрації можуть зменшуватися через конвергенцію поверхні та опускання водної маси. Крім того, CO<sub>2</sub> можуть транспортуватися до глибинних шарів води через фізичні та біогеохімічні процеси, а також повертатися з осаду до верхніх шарів через процеси ресуспензії та апвелінгу (Liu M. et al., 2021).

Дослідження проведено на основі методів гідрохімічного аналізу, закономірностях просторово-часових змін якісних характеристик морських екосистем, теоретичному узагальненні та систематизації інформації про вплив антропогенних джерел забруднення.

Було відібрано проби з трьох ділянок (пляж Аркадія, мис Малий Фонтан та Чорноморський яхт-клуб) для характеристики їхніх фізико-хімічних властивостей у районі Одеського узбережжя. Глибина відбору проб поверхневого шару становила 0–1 м. Проведено *in situ* вимірювання температури (T), pH та солоності у кожній точці відбору проб. Температуру визначали за допомогою стандартного термометра за Цельсієм з точністю  $\pm 0,5^\circ\text{C}$ . Значення pH та солоності вимірювали pH-метром (WTW inoLab pH 720) та солеміром (ГМ-65). Крім того, у лабораторних умовах визначали вміст розчиненого кисню та біохімічне споживання кисню за 5 діб (БСК<sub>5</sub>)

відповідно до стандартних аналітичних методик. Персистентні органічні забруднюючі речовини зазвичай визначають за допомогою аналітичних методів, затверджених такими організаціями, як Агентство з охорони довкілля США (USEPA) та Міжнародна організація зі стандартизації (ISO). Їх вилучення із проб здійснювали методом рідинно-рідинної екстракції гексаном у режимі високошвидкісного вортексування. Перед початком екстракції до проб вносили внутрішні стандарти ПХБ-29 та фенантрен-D10.

Концентровані екстракти ХОП і ПХБ аналізували за допомогою газового хроматографа Agilent 7890B (Palo Alto, CA, USA) з детектором електронного захоплення (GC/ECD) та капілярною колонкою HP-5MS (30 м  $\times$  0,32 мм  $\times$  0,25 мкм). Газ-носієй – гелій із постійною швидкістю потоку 2 мл/хв; інжекцію проводили в splitless-режимі при 250 °C. Температурну програму колонки задавали: 70 °C (1 хв)  $\rightarrow$  150 °C з швидкістю 10 °C/хв  $\rightarrow$  240 °C з швидкістю 4 °C/хв із витримкою 5 хв. Температура інжектора становила 250 °C. Обробку даних виконували за допомогою ChemStation. Кількісне визначення здійснювали порівнянням площ піків проб і стандартів, з побудовою калібрувальних кривих для дев'яти ХОП (гексахлорбензен, ліндан, гептахлор, елдрин, дилдрин, ендрин, p,p'-DDE, p,p'-DDD, p,p'-DDT) та семи ПХБ (PCB 28, PCB 52, PCB 101, PCB 118, PCB 138, PCB 152, PCB 180).

Концентрації цільових ПАВ визначали за допомогою газового хроматографа з квадрупольним мас-спектрометром (GC-MS/MS, 7890A-5975 S, Agilent, США) з капілярною колонкою DB-5MS (30 м  $\times$  0,25 мм  $\times$  0,25 мкм). Інжекція виконувалася в splitless-режимі при 500 °C, об'єм зразка – 15 мкл, вентиляція розчинника – 1 хв. Температурну програму колонки встановлювали: 60 °C (7 хв)  $\rightarrow$  200 °C (10 °C/хв, 1 хв)  $\rightarrow$  310 °C (7 °C/хв, 5 хв), що забезпечувало повне елюювання компонентів. Мас-детектор працював у режимі SIM (Selective Ion Monitoring) при температурі іонного джерела 230 °C та квадрупольна 150 °C. Калібрування проводили зі стандартною сумішшю 16 пріоритетних ПАВ. Обробку даних здійснювали за допомогою ChemStation та AMDIS (Agilent, США).

Рівень забруднення морського середовища визначали за коефіцієнтом забруднення (K<sub>z</sub>) за формулою:

$$K_s = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{C_i}{ГДК_i}$$

де  $C_i$  – концентрація  $i$ -го забруднювача,  $ГДК_i$  – гранично допустима концентрація для  $i$ -го компоненту (відповідно директиві ЄС 2013/39/EU (МАС-EQS) та нормативу (Постанова КМУ. № 269. Правила охорони внутрішніх морських вод територіального моря від забруднення та засмічення, 1996),  $n$  – кількість визначених речовин

Усі перетворення та аналізи даних були виконані за допомогою MS Excel 365 та мови статистичних обчислень R Studio (версія 4.5.1), а рисунки були отримані за допомогою пакета ggplot2. Усі твердження про статистичну значущість вказують на  $p$ -значення  $< 0,05$ .

На рис. 1, рис. 2 представлені графічно фізико-хімічні характеристики морської води з різних місць протягом досліджуваного періоду (2 місяці).

Зафіксована температура має подібний профіль на всіх досліджуваних станціях і коливається від 12,60 °C до 20,50 °C. Ці варіації пов'язані зі змінами температури повітря та кліматичними умовами регіону, оскільки морське середовище реагує на погодні коливання.

Значення рН відіграють вирішальну роль у багатьох життєвих процесах у морі. Вони також можуть відображати рівень продуктивності та забруднення водних екосистем. Як показано на рис. 1, рН протягом усього періоду дослідження залишався слабколужним на всіх станціях, а максимальні значення були

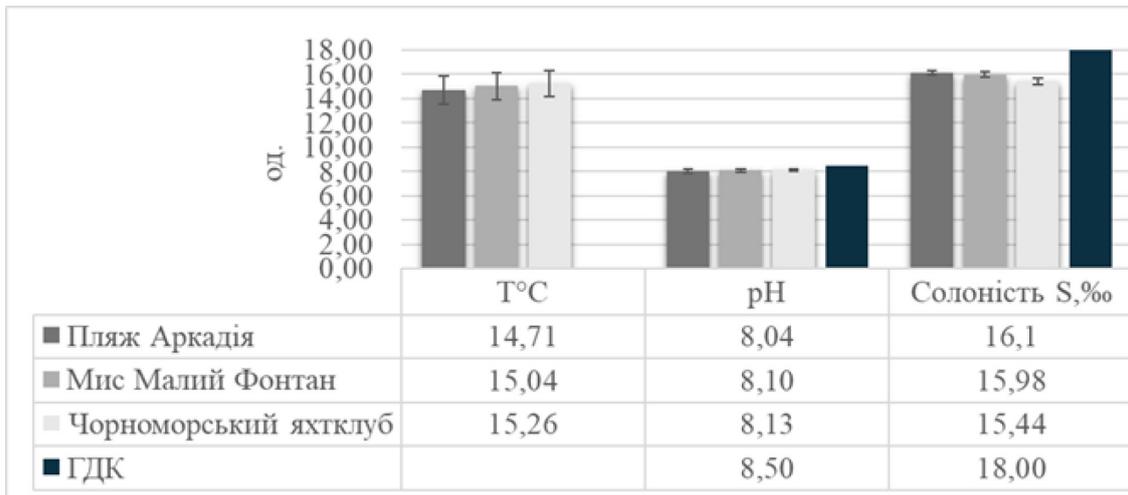


Рис. 1. Середньомісячні гідрохімічні показники з урахуванням похибки ( $n = 8$ ;  $P = 0,95$ )

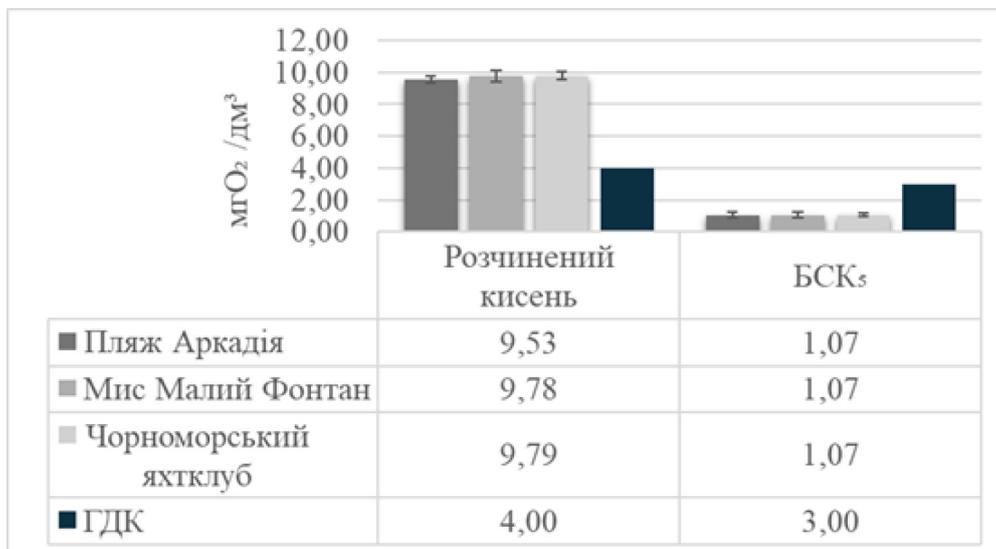


Рис. 2. Середньомісячні показники вмісту розчиненого кисню та БСК з урахуванням похибки ( $n = 8$ ;  $P = 0,95$ )

zareєстровані на третій станції (8,13). Ці показники добре узгоджуються з типовим рН морської води – 6,5–8,5.

Показники солоності на досліджуваних станціях варіювали у межах від 15,44 ‰ до 16,10 ‰. Найнижча солоність була зафіксована біля Чорноморського яхтклубу, ймовірно, через вплив прісноводного притоку, тоді як вищі значення в Аркадії можуть бути пов'язані з більшою глибиною та слабшим прісноводним стоком.

Протягом періоду дослідження середній рівень розчиненого кисню коливався в межах від 9,53 до 9,79 мг/дм<sup>3</sup>, що свідчить про достатнє насичення води киснем і відносно сприятливі умови для водних організмів. Середнє значення БСК<sub>5</sub> становило 1,07 мг/дм<sup>3</sup> на всіх станціях спостереження, що вказує на низький рівень органічного забруднення та добру якість води (рис. 2).

При дослідженні прибережних вод на вміст індивідуальних ПХБ (рис. 3) було зафіксовано низький рівень забруднення. При порівнянні досліджених концентрації стандартних сумішей індивідуальних ПХБ від ПХБ-16 по ПХБ-65 (Ar-1254) та стандартної суміші від ПХБ-28 по ПХБ-73 (Ar-1260) з ГДК. ПХБ з  $\geq 3$  атомами хлору, розташованими в орто-положенні (ПХБ-31), мало найвищу концентрацію у зразках води. Усі цільові конгенери у зразках води Чорного моря не перевищували порогові критерії оцінки впливу на навколишнє середовище (OSPAR, 2019).

Найпоширенішою сполукою ХОП була сума метаболітів дихлордифенілтрихлорметан

( $\sum ДДТ = 3,52$  нг/л), за нею йшли гексахлорциклогексан ( $\sum ГХЦГ = 0,24$  нг/л) та гептахлор (0,34 нг/л) (рис. 4). Інші ХОП, такі як гексахлорбензол (ГХБ = 0,06 нг/л) та  $\sum$ цикло-дієнові пестициди (альдрин, дільдрин та ендрин = 0,22 нг/л), були виявлені у нижчих концентраціях. Найвища концентрація ПАВ спостерігалася у нафталіну (16,29 нг/л), хоча, незважаючи на його поширеність у зразках води Чорного моря, концентрація була нижчою за межу ГДК (рис. 4). Серед чотирикільцевих ПАВ були визначені бензо[b]флуорантен (BbF = 0,24 нг/л) та бензо[k]флуорантен (BkF = 0,12 нг/л), тоді як ПАВ з п'ятьма ароматичними кільцями, зокрема бензо[a]пірен (BaP = 0,03 нг/л) та бензо[g,h,i]пірен (BghiP = 0,04 нг/л), були виявлені у менших концентраціях, що свідчить про їх нижчу розповсюдженість у поверхневому шарі морської води.

Також була проведена оцінка екологічного стану прибережних водних масивів за коефіцієнтом забруднення для СОЗ. Значення Кз свідчить про задовільний екологічний стан на станціях Пляж Аркадія та Чорноморський яхтклуб, а також про добрий стан у районі мису Малий Фонтан. Найбільший вклад в рівень забруднення у досліджених районах припадає на концентрації гептахлору, що відповідає «поганому» екологічному стану.

**Висновки та перспективи подальших досліджень.** У цьому дослідженні вивчали концентрації стійких органічних забруднюючих речовин (СОЗ), а також фізико-хімічні параметри морської води на трьох станціях прибережної зони Чорного моря. Результати

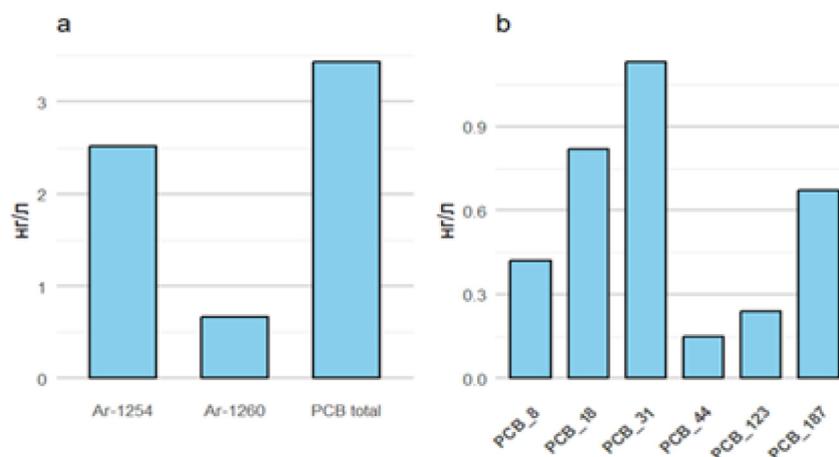


Рис. 3. Усереднена за трьома станціями концентрація ПХБ у поверхневому шарі води:  
а) загальна та за Aroclors (AR-1254: ПХБ-16–65, AR-1260: ПХБ-28–73);  
б) окремі конгенери ПХБ ( $n = 2$ )

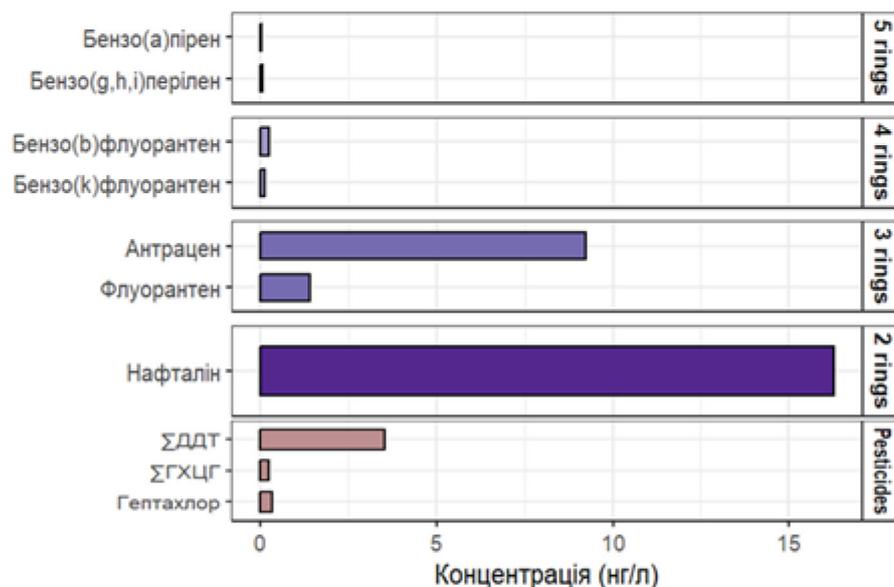


Рис. 4. Усереднена за трьома станціями концентрація деяких ХОП та ПАВ ( $n = 2$ )

концентрацій забруднювачів і фізико-хімічних показників були використані для оцінки екологічного стану води та виявлення джерел забруднення і не мали відхилень від нормативів якості. Встановлено, що фізико-хімічні параметри, такі як солоність, температура, прозорість та рівень оксигенації, відображають загальну якість води та її придатність для існування гідробіонтів. Оцінка концентрацій СО<sub>2</sub> дозволяє визначити основні забруднювачі та їх

внесок у формування сумарного рівня забруднення. Незважаючи на відносно задовільний стан водного середовища, не варто ігнорувати вплив антропогенної діяльності, що може призвести до поступового погіршення якості води у сучасних умовах. У цьому аспекті регулярний моніторинг фізико-хімічних показників і концентрацій СО<sub>2</sub> є ключовим інструментом для збереження екологічної цілісності морського басейну та забезпечення сталого розвитку.

#### ЛІТЕРАТУРА:

- Chidewe L., Zhang R., Shi X., Zhang Z. Occurrence and ecological risks of organochlorine pesticides and polychlorinated biphenyls in a semi-enclosed urban watershed. *Frontiers in Marine Science*. 2025. Vol. 12. P. 10.
- Тітяпкин А. С. Оцінка стану морських вод за показниками евтрофованості відповідно до ДЕС за дескриптором 5 РДМС. Одеса: НДУ УкрНЦЕМ, 2024. 95 с.
- Denga Y. M., Mykhailenko V. I., Oleynik Y. V., Safranov T. A. Peculiarities of Pollution by Some Persistent Organic Pollutants of the Marine Environment of the Northwestern Part of the Black Sea. *Visnyk of V. N. Karazin Kharkiv National University. Series Ecology*. 2020. Vol. 23. P. 8–20.
- Oleinik I., Prekrasna I., Pavlovska M., Dykyi E., Slobodnik J., Alygizakis N., Solomenko L., Stoica E. Bacterial communities of the Black Sea exhibit activity against persistent organic pollutants in the water column and sediments. *Ecotoxicology and Environmental Safety*. 2022. Vol. 234. P. 12.
- Readman J. W., Fillmann G., Tolosa I., et al. Petroleum and PAH contamination of the Black Sea. *Marine Pollution Bulletin*. 2002. Vol. 44, No.1. P. 48–62.
- El Nemr A., El-Sadaawy M. M. Polychlorinated biphenyl and organochlorine pesticide residues in surface sediments from the Mediterranean Sea (Egypt). *International Journal of Sediment Research*. 2016. Vol. 31, No. 1. P. 44–52.
- Malhat F. M., Loutfy N. M., Greish S. S., Ahmed M. T. A Review of Environmental Contamination by Organochlorine and Organophosphorus Pesticides in Egypt. *Journal of Toxicology and Risk Assessment*. 2018. Vol. 4, No. 1. P. 17.
- Zhang L., Yang L., Zhou Q. et al. Size distribution of particulate polycyclic aromatic hydrocarbons in fresh combustion smoke and ambient air: A review. *Journal of Environmental Sciences* 2020. Vol. 88. P. 370–384.
- Liu M., Hu J., Lin Y, et al. Full-depth profiles of PAHs in the Western South China Sea: Influence of Upwelling and Mesoscale Eddy. *Chemosphere*. 2021. Vol. 263. P. 12.
- Directives 2000/60/EC and 2008/105/EC as regards priority substances in the field of water policy. *Official Journal of the European Union*. 12 August 2013. L 226. P. 1–17.

11. Постанова КМУ від 29.02.96 № 269. Правила охорони внутрішніх морських вод територіального моря від забруднення та засмічення. *Офіційний вісник України*. 1996. № 9. С. 14–21.

12. OSPAR Commission. *2019 Updated Audit Trail of OSPAR EACs and Other Assessment Criteria Used to Distinguish Above and Below Thresholds*. 2019. P.22. URL: <https://www.ospar.org/documents?v=43066>. Дата звернення: 24.11.2025 р.

#### REFERENCES:

1. Chidewe, L., Zhang, R., Shi, X., & Zhang, Z. (2025). Occurrence and ecological risks of organochlorine pesticides and polychlorinated biphenyls in a semi-enclosed urban watershed. *Frontiers in Marine Science*, 12, 10.

2. Tityapkin, A. S. (2024). *Otsinka stanu morskyykh vod za pokaznykamy evtrofovanosti vidpovidno do DES za deskriptorom 5 RDMS [Assessment of marine water status based on eutrophication indicators according to the DES descriptor 5]*. Odesa : National Research Center of Ukraine, UkrNCEM [in Ukrainian].

3. Denga, Y. M., Mykhailenko, V. I., Oleynik, Y. V., & Safranov, T. A. (2020). Peculiarities of pollution by some persistent organic pollutants of the marine environment of the northwestern part of the Black Sea. *Visnyk of V. N. Karazin Kharkiv National University. Series Ecology*, 23, 8–20.

4. Oleinik, I., Prekrasna, I., Pavlovska, M., Dykyi, E., Slobodnik, J., Alygizakis, N., Solomenko, L., & Stoica, E. (2022). Bacterial communities of the Black Sea exhibit activity against persistent organic pollutants in the water column and sediments. *Ecotoxicology and Environmental Safety*, 234, 12.

5. Readman, J. W., Fillmann, G., Tolosa, I., & et al. (2002). Petroleum and PAH contamination of the Black Sea. *Marine Pollution Bulletin*, 44(1), 48–62.

6. El Nemr, A., & El-Sadaawy, M. M. (2016). Polychlorinated biphenyl and organochlorine pesticide residues in surface sediments from the Mediterranean Sea (Egypt). *International Journal of Sediment Research*, 31(1), 44–52.

7. Malhat, F. M., Loutfy, N. M., Greish, S. S., & Ahmed, M. T. (2018). A review of environmental contamination by organochlorine and organophosphorus pesticides in Egypt. *Journal of Toxicology and Risk Assessment*, 4(1), 17.

8. Zhang, L., Yang, L., Zhou, Q., & et al. (2020). Size distribution of particulate polycyclic aromatic hydrocarbons in fresh combustion smoke and ambient air: A review. *Journal of Environmental Sciences*, 88, 370–384.

9. Liu, M., Hu, J., Lin, Y., & et al. (2021). Full-depth profiles of PAHs in the Western South China Sea: Influence of upwelling and mesoscale eddy. *Chemosphere*, 263, 12.

10. European Union. (2013). Directives 2000/60/EC and 2008/105/EC as regards priority substances in the field of water policy. *Official Journal of the European Union*, L 226, 1–17.

11. Cabinet of Ministers of Ukraine. (1996, February 29). *Pravylo okhorony vnutrishnikh morskyykh vod ta terytorialnoho moria vid zabrudnennia ta zasmichennia [Rules for the protection of internal marine waters and the territorial sea from pollution and littering]* (Resolution No. 269). *Ofitsiynyi visnyk Ukrainy*, (9), 14–21. [in Ukrainian].

12. OSPAR Commission. (2019). *Updated audit trail of OSPAR EACs and other assessment criteria used to distinguish above and below thresholds*. 22. Retrieved from <https://www.ospar.org/documents?v=43066>.

Стаття надійшла: 27.11.2025

Прийнято: 08.12.2025

Опубліковано: 30.12.2025

UDC 543.4:638.162

DOI <https://doi.org/10.32782/pcsd-2025-4-2>

**Vira ISHCENKO**

*Candidate of Chemical Sciences, Associate Professor, Associate Professor at the Department of Food Chemistry, National University of Food Technologies, 68 Volodymyrska str., Kyiv, Ukraine, 01601*

**ORCID:** 0000-0002-0218-8516

**Scopus Author ID:** 57205115020

**Khristina CHEBANENKO**

*Senior Lecturer at the Department of Food Chemistry, National University of Food Technologies, 68 Volodymyrska str., Kyiv, Ukraine, 01601*

**ORCID:** 0000-0001-5002-1393

**Scopus Author ID:** 57204350944

**Rostislav BARABASH**

*Postgraduate Student at the Department of Analytical Chemistry, Taras Shevchenko National University of Kyiv, 64 Volodymyrska str., Kyiv, Ukraine, 01601*

**ORCID:** 0009-0006-2555-3260

**Nadia KVITKOVSKA**

*Senior Lecturer in the Department of Food Chemistry, National University of Food Technologies, 68 Volodymyrska str., Kyiv, Ukraine, 01601*

**ORCID:** 0009-0008-3268-0510

**Scopus Author ID:** 57475955300

**Elizaveta KOSTENKO**

*Doctor of Chemical Sciences, Professor, Professor at the Department of Food Chemistry, National University of Food Technologies, 68 Volodymyrska str., Kyiv, Ukraine, 01601*

**ORCID:** 0000-0003-2870-9292

**Scopus Author ID:** 7003419146

**Olexander MAKARENKO**

*PhD in Chemistry, Associate Professor, Associate Professor at the Department of Food Chemistry, National University of Food Technologies, 68 Volodymyrska str., Kyiv, Ukraine, 01601*

**ORCID:** 0000-0002-9472-3546

**Scopus Author ID:** 26643077300

**To cite this article:** Ishchenko, V., Chebanenko, Kh., Barabash, R., Kvitkovska, N., Kostenko, E., Makarenko, O. (2025). Spektrofotometrychne vyznachennia 5-hidroksymetylfurfuroolu u zrazkakh medu riznoho botanichnoho pokhodzhennia [Spectrophotometric determination of 5-hydroxymethylfurfural in honey samples of various botanical origins]. *Problems of Chemistry and Sustainable Development*, 4, 10–17, doi: <https://doi.org/10.32782/pcsd-2025-4-2>

## SPECTROPHOTOMETRIC DETERMINATION OF 5-HYDROXYMETHYLFURFURAL IN HONEY SAMPLES OF VARIOUS BOTANICAL ORIGINS

*Improper processing, storage conditions, or adulteration of honey promotes the formation of 5-hydroxymethylfurfural (HMF). HMF is detrimental to human health if the consumption level exceeds the limit established by regulatory bodies. The Codex Alimentarius Commission and the European Union have set the HMF limit in honey at 40 mg/kg, with a higher limit of 80 mg/kg for countries or regions with tropical temperatures. The International Honey Commission recommends three methods for HMF determination: two spectrophotometric methods (the White method and the Winkler method) and High-Performance Liquid Chromatography (HPLC). However, the regulated Winkler method is predominantly used for HMF determination in research conducted in Ukraine. In this study, 17 honey samples collected between 2022 and 2025 and having various botanical origins were analyzed using the White method. This method is based on the cleavage of the HMF chromophore system by the action of sodium metabisulfite. The difference in light absorption at a wavelength of 284 nm between the honey sample treated with metabisulfite and the untreated sample is proportional to the HMF concentration. To eliminate the effects of light scattering and light absorption by the honey matrix, measurements were conducted at two wavelengths: 284 nm and 336 nm. Monofloral honey samples (sunflower, linden, acacia, rapeseed, and amaranth), polyfloral wildflower honey, and blended honey samples were analyzed. The HMF content in almost all tested honey samples was significantly lower than the recommended limit. The lowest HMF content was found in monofloral honeys such as linden and sunflower, ranging from 0.63 to 2.8 mg/kg. A slightly higher HMF content was observed in acacia honey samples, ranging from 10.8 to 14.6 mg/kg. The HMF content in polyfloral wildflower honey and blended honey samples fell within the same range. Analysis of sunflower, rapeseed, and amaranth honey harvested in 2025 demonstrated that their HMF content was significantly below the normative values.*

**Keywords:** honey quality, 5-hydroxymethylfurfural, spectrophotometry.

### **Віра ІЩЕНКО**

*кандидат хімічних наук, доцент, доцент кафедри харчової хімії, Національний університет харчових технологій, вул. Володимирська, 68, м. Київ, Україна, 01601*

**ORCID:** 0000-0002-0218-8516

**Scopus Author ID:** 57205115020

### **Христина ЧЕБАНЕНКО**

*старший викладач кафедри харчової хімії, Національний університет харчових технологій, вул. Володимирська, 68, м. Київ, Україна, 01601*

**ORCID:** 0000-0001-5002-1393

**Scopus Author ID:** 57204350944

### **Ростислав БАРАБАШ**

*аспірант кафедри аналітичної хімії, Київський національний університет імені Тараса Шевченка, вул. Володимирська, 64, м. Київ, Україна, 01601*

**ORCID:** 0009-0006-2555-3260

### **Надія КВІТКОВСЬКА**

*старший викладач кафедри харчової хімії, Національний університет харчових технологій, вул. Володимирська, 68, м. Київ, Україна, 01601*

**ORCID:** 0009-0008-3268-0510

**Scopus Author ID:** 57475955300

### **Єлизавета КОСТЕНКО**

*доктор хімічних наук, професор, професор кафедри харчової хімії, Національний університет харчових технологій, вул. Володимирська, 68, м. Київ, Україна, 01601*

**ORCID:** 0000-0003-2870-9292

**Scopus Author ID:** 7003419146

**Олександр МАКАРЕНКО**

кандидат хімічних наук, доцент, доцент кафедри харчової хімії, Національний університет харчових технологій, вул. Володимирська, 68, м. Київ, Україна, 01601

**ORCID:** 0000-0002-9472-3546

**Scopus Author ID:** 26643077300

**Бібліографічний опис статті:** Іщенко, В., Чебаненко, Х., Барабаш, Р., Квітковська, Н., Костенко, Є., Макаренко, О. (2025). Спектрофотометричне визначення 5-гідроксиметилфурфуролу у зразках меду різного ботанічного походження. *Проблеми хімії та сталого розвитку*, 4, 10–17, doi: <https://doi.org/10.32782/pcsd-2025-4-2>

## СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧНЕ ВИЗНАЧЕННЯ 5-ГІДРОКСИМЕТИЛФУРФУРОЛУ У ЗРАЗКАХ МЕДУ РІЗНОГО БОТАНІЧНОГО ПОХОДЖЕННЯ

Неправильні умови обробки, зберігання або фальсифікація меду сприяють утворенню 5-гідроксиметилфурфуролу (ГМФ), який шкідливий для здоров'я людини, якщо рівень споживання перевищує ліміт, встановлений регуляторними органами. Комісія Codex Alimentarius та Європейський Союз встановили межу ГМФ у меді 40 мг/кг, а для країн або регіонів з тропічними температурами 80 мг/кг. Міжнародна медова комісія рекомендує три методи визначення ГМФ: два спектрофотометричні методи визначення за методом Уайта та Вінклера і високоефективну рідинну хроматографію. Проте в дослідженнях, які проводяться в Україні, для визначення ГМФ в основному використовують регламентований метод Вінклера. В даному дослідженні 17 зразків меду 2022–25 років збору та різного ботанічного походження були проаналізовані методом Уайта, який ґрунтується на руйнуванні хромофорної системи ГМФ дією метабісульфіту натрію. Різниця світлопоглинання при довжині хвилі світла 284 нм меду, який оброблений метабісульфітом, та без обробки пропорційна концентрації ГМФ. Для усунення ефектів світлорозсіювання та поглинання світла матрицею меду вимірювання проводили при двох довжинах хвиль: 284 нм і 336 нм. Для визначення були взяті монофлорні зразки меду (соняшниковий, липовий, акацієвий, ріпаковий та амарантовий), поліфлорний мед із різнотрав'я та купажовані зразки меду. Вміст ГМФ майже у всіх протестованих медах був значно нижчим рекомендованої норми. Найнижчий вміст ГМФ був у таких монофлорних медах як липовий та соняшниковий і знаходився в межах 0,63–2,8 мг/кг. Деяко вищий вміст ГМФ був у зразках акацієвого меду і знаходився в межах 10,8–14,6 мг/кг. В таких же межах знаходився вміст ГМФ у поліфлорному квітковому меді та у зразках купажованого меду. Аналіз соняшникового, ріпакового та амарантового меду 2025 року збору, показав, що вміст ГМФ був у них значно нижче нормативних значень.

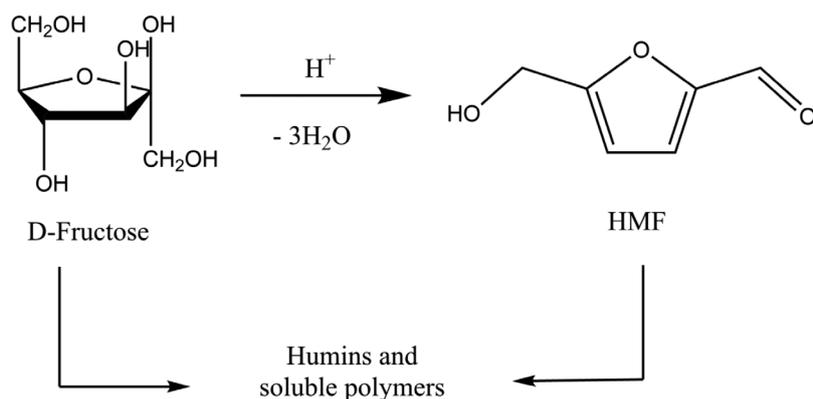
**Ключові слова:** якість меду, 5-гідроксиметилфурфурол, спектрофотометрія.

Honey is a well-known unique beekeeping product characterized by a high content of active substances essential for the vital activity of the human body. It is distinguished by its botanical origin, consistency, color, and method of harvesting. Although the medicinal properties of honey are not yet fully understood, numerous researchers and scientists in various fields confirm that it is an indispensable consumer product with incredibly beneficial properties (Samarghandian et al., 2017; Sharaf et al., 2025). Given its use as a medicinal agent, honey must possess the highest quality, a requirement emphasized by the European Parliament Directive (Directive 2014/63).

As of the end of 2024, Ukraine ranked third globally in honey export volumes, surpassed only by China and India. Therefore, systematic quality control of Ukrainian honey is crucial for ensuring consumer trust and is a key factor in increasing the sector's export potential. According to the State

Standard of Ukraine DSTU 4497:2005 («Natural Honey. Specifications»), honey quality is determined by various organoleptic and physicochemical parameters. One of the quality indicators for honey is its content of 5-hydroxymethylfurfural (HMF). HMF primarily forms during the thermal processing of carbohydrate-containing foods through acid-catalyzed thermal dehydration from fructose, sucrose, and, to a lesser extent, glucose. The scheme for HMF formation from fructose is shown in Figure 1.

The Codex Alimentarius Commission and the European Union (Directive 2001/110) have established an HMF limit in honey of 40 mg/kg, with a higher limit of 80 mg/kg for countries or regions with tropical temperatures. The HMF content and diastase activity (Bhure et al., 2025) are considered key indicators used for honey quality control regarding its freshness and possible overheating.



**Fig. 1. Scheme of HMF formation from fructose**

The study of HMF properties and the control of its content in food products began in the 1950s due to its harmful effects on the organism, including carcinogenic, mutagenic, genotoxic, and organotoxic effects. The most comprehensive reviews on the impact of HMF on the body are presented in the works (Abraham et al., 2011; Shapla et al., 2018; Greilberger et al., 2025). However, attributing HMF formation solely to the thermal processing of honey would be inaccurate, as several other factors also contribute to its elevated concentration in honey. High HMF concentration may indicate improper processing and storage conditions (Mouhoubi-Tafnine et al., 2018) or honey adulteration with invert syrup (Abdi et al., 2024). Furthermore, the botanical origin of honey (Vijan et al., 2023), pH, the concentration of divalent cations in the medium (Capuano & Fogliano, 2011), and the geographical location of the melliferous plants (Tasic et al., 2024) are factors that influence the HMF level.

The International Honey Commission recommends three methods for HMF determination: two spectrophotometric methods (the White method and the Winkler method) and High-Performance Liquid Chromatography (HPLC). In Ukraine, the HMF content in honey is determined using the Winkler method (DSTU 4497:2005). The Winkler method is based on the absorption at 550 nm of a colored complex formed by the reaction of *p*-toluidine with HMF in a barbituric acid medium. However, studies (Zappal et al., 2005) have shown that the Winkler method yields slightly overestimated results, whereas the White method and the chromatographic method produce results within the statistical error margin. Furthermore, the Winkler method employs *p*-toluidine, which possesses toxic and carcinogenic properties.

The White method, first described in 1979 (White, 1979), is based on the cleavage of the HMF chromophore system by the action of sodium metabisulfite. The difference in light absorption at a wavelength of 284 nm between the honey sample treated with metabisulfite and the untreated sample is proportional to the HMF concentration. The HMF content is calculated using the tabulated value of the molar absorption coefficient  $\epsilon^{284} = 16,830$  (Zappal et al., 2005). To eliminate the effects of light scattering and light absorption by the honey matrix, measurements are performed at two wavelengths: 284 nm and 336 nm.

We have not found the use or detailed description of the White method for HMF determination in honey for quality control of domestic honeys in Ukrainian scientific publications. Therefore, the aim of this study was the spectrophotometric determination of HMF in honey samples of various botanical origins using the White method and the assessment of the quality of the studied samples based on their HMF content.

Seventeen honey samples, differing in botanical and geographical origin and year of collection, were selected for the study (Table 1). The samples were collected between 2022 and 2025. Samples 3, 10, 15–17 were provided by a beekeeper from a certified apiary in the Cherkasy region, while the blended samples 12–14 were supplied by a leading Ukrainian honey trading company. The remaining samples were purchased at agricultural markets. HMF determination was performed during 2024–2025. Sample No. 3 was analyzed in 2024 and then re-analyzed a year later in 2025 (listed as No. 9 in the table).

The following reagents were prepared for the analysis: Carrez solution 1  $K_4[Fe(CN)_6]$  15 % solution), Carrez solution 2  $(Zn(CH_3COO)_2$

30 % solution), and a 0.2 % solution of sodium metabisulfite ( $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_5$ ), which had to be freshly prepared for use. Absorbance measurements were performed on a Shimadzu UV2100 PC spectrophotometer (Shimadzu, Japan) in the range of 284–336 nm using 10 mm path length quartz cuvettes.

The determination methodology included the following procedures: 5 g of the honey sample was accurately weighed (with a precision of 0.001 g) into a 50 mL beaker. The sample was dissolved in approximately 25 mL of distilled water and quantitatively transferred to a 50 mL volumetric flask. 0.5 mL of Carrez solution 1 was added and mixed. Then, 0.5 mL of Carrez solution 2 was added, and the volume was adjusted to the mark with water. Any foam present was removed by adding a drop of ethanol. The solution was filtered through a paper filter into a clean, dry beaker, discarding the first 10 mL of the filtrate. Two 5.00 mL aliquots of the filtrate were measured into two test tubes (18 · 50 mm). To the first tube (test solution), 5.00 mL of distilled water was added and mixed. To the second tube (reference solution), 5.00 mL of a 0.2 % sodium metabisulfite solution was added and mixed. The absorbance of the test solution relative to the reference solution was measured at wavelengths of 284 nm and 336 nm in

a 10 mm quartz cuvette no later than one hour after solution preparation.

The result of the analysis was calculated using the formula:

$$w(\text{HMF}), \text{ mg/kg} = \frac{(A^{284} - A^{336}) \cdot 748,7 \cdot DF}{m},$$

where:

- $A^{284}$  is the absorbance at 284 nm;
- $A^{336}$  is the absorbance at 336 nm;
- $DF$  is the dilution factor (if any), otherwise, it is one;
- $m$  is the mass of the weighed honey sample, g;
- 748.7 is a constant, calculated as:

$$748,7 = \frac{126 \cdot 10 \cdot 50 \cdot 1,000 \cdot 1,000}{16,830 \cdot 5 \cdot 1,000},$$

where:

- 126 is the molar mass of HMF, g/mol;
- 1000 (numerator) is the conversion of mL to L;
- 1000 (numerator) is the conversion of g to mg;
- 1000 (denominator) is the conversion of g of honey to kg;
- 10 is the final volume of the test solution, mL;
- 5 is the volume of the honey sample aliquot taken for analysis, mL;
- 50 is the volume of the honey sample solution, mL.

Table 1

### 5-Hydroxymethylfurfural Content in the Studied Honey Samples

Sample №	Botanical Origin	Year of Collection	Year of Analysis	Geographical Origin	HMF Content, mg/kg ( $P = 0.95, n = 3$ )
1	Linden, liquid consistency	2022	2024	Cherkasy region	2.81 ± 0.64
2	Linden, crystallized	2022	2024	Cherkasy region	1.83 ± 0.63
3	Linden, crystallized	2023	2024	Cherkasy region	<0.65*
4	Sunflower, liquid consistency	2024	2024	Dnipropetrovsk region	2.15 ± 0.63
5	Sunflower, liquid consistency	2024	2024	Cherkasy region	<0.65
6	Wildflower, liquid consistency	2024	2024	Kyiv region	9.47 ± 0.72
7	Wildflower, liquid consistency	2024	2024	Dnipropetrovsk region	11.74 ± 0.74
8	Wildflower, liquid consistency	2023	2024	Cherkasy region	42.3 ± 1.1
9	Linden, crystallized	2023	2025	Cherkasy region	1.75 ± 0.63
10	Acacia, crystallized	2024	2025	Cherkasy region	10.8 ± 0.73
11	Acacia, liquid	2024	2025	Chernihiv region	14.6 ± 0.78
12	Blended, crystallized	2024	2025	Ukrainian honey trader company	9.30 ± 0.72
13	Blended, crystallized	2024	2025	Ukrainian honey trader company	10.3 ± 0.72
14	Blended, crystallized	2025	2025	Ukrainian honey trader company	11.9 ± 0.75
15	Sunflower, crystallized	2025	2025	Cherkasy region	2.03 ± 0.63
16	Rapeseed, crystallized	2025	2025	Cherkasy region	2.74 ± 0.64
17	Amaranth, liquid	2025	2025	Cherkasy region	±0.63

\* limit of detection of the method.

The characteristics of the samples and the results of the 5-hydroxymethylfurfural determination are presented in Table 1.

As indicated by the results, the HMF content in almost all samples was significantly lower than the acceptable limit of 40 mg/kg. Only one sample, No. 8, purchased from a private entrepreneur, had a slightly elevated HMF content. This sample may have undergone thermal processing or even been adulterated with inverted sugar syrup. The lowest HMF content was found in monofloral honeys such as linden and sunflower (samples 1–5, 15), ranging from 0.65 to 2.8 mg/kg. No correlation was observed between the honey consistency (liquid or crystallized) and the HMF content. Linden honey Sample No. 3 (2023 harvest) with an HMF content of <0.65 mg/kg was re-analyzed in 2025 (Sample No. 9): the HMF content slightly increased to 1.75 mg/kg. This suggests that HMF content increases only slightly under proper storage conditions and in the absence of excessive thermal processing. A slightly higher HMF content among the monofloral honeys was observed in the acacia honey samples (samples 10–11), ranging from 10.8 to 14.6 mg/kg. The HMF content in polyfloral wildflower honey (samples 6–7) and blended honey samples (12–14) fell within the same range,

specifically 9.3–11.9 mg/kg. Regarding the 2025 harvest, unfavorable weather conditions resulted in a negligible collection of traditional Ukrainian honeys such as acacia and wildflower varieties. However, analysis of sunflower, rapeseed, and amaranth honey harvested in 2025 showed that their HMF content was significantly below the normative values (1.67–2.74 mg/kg).

The spectrophotometric method used in this study for the determination of 5-hydroxymethylfurfural in honey (the White method) is simple to execute, employs safe reagents, and meets the objective of the study. Given that honey quality determination is critically important for Ukraine to ensure consumer safety and protect the reputation of its export products, this method can be successfully utilized in food quality control laboratories. Honey samples from 2022 to 2025 of various botanical origins were analyzed using this methodology. The HMF content in almost all tested honey samples was significantly lower than the recommended standard, which may indicate that these samples have not undergone thermal processing. The lowest HMF content was found in monofloral honeys (linden, sunflower, rapeseed, and amaranth), with a slightly higher content in polyfloral wildflower honey and blended honey samples.

#### BIBLIOGRAPHY:

1. Abdi G. G., Tola Y. B., Kuyu C. G. Assessment of physicochemical and microbiological characteristics of honey in Southwest Ethiopia: Detection of adulteration through analytical simulation. *Journal of Food Protection*. 2024. Vol. 87. № 1. 100194. DOI:10.1016/j.jfp.2023.100194
2. Abraham K., Gürtler R., Berg K., Heinemeyer G., Lampen A., Appel K. E. Toxicology and risk assessment of 5-Hydroxymethylfurfural in food. *Molecular Nutrition & Food Research*. 2011. Vol.55. № 5. P. 667–678. DOI: 10.1002/mnfr.201000564
3. Bhure R. A., Alam M., Nanda V., Pawar V. M. Saxena S. Exploring the Impact of Thermal Processing on the Quality Attributes of Honey: A Comprehensive Review. *Journal of Food Process Engineering*. 2025. Vol. 48. № 1. DOI: 10.1111/jfpe.70033
4. Capuano E., Fogliano, V. Acrylamide and 5-hydroxymethylfurfural (HMF): A review on metabolism, toxicity, occurrence in food and mitigation strategies. *LWT- Food Science and Technology*, 2011. Vol. 44. № 4. P. 793–810. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.lwt.2010.11.002>
5. Council Directive 2001/110/EC of 20 December 2001 relating to honey.. URL: <https://eur-lex.europa.eu/eli/dir/2001/110/oj/eng> (accessed on 1 October 2025).
6. Directive 2014/63/EU of The European Parliament and of the Council of 15 May 2014 Amending Council Directive 2001/110/EC Relating to Honey. URL: <https://eur-lex.europa.eu/eli/dir/2014/63/oj/eng> (accessed on 1 October 2025).
7. Greilberger J., Feigl G., Greilberger M., Bystrianska S., Greilberger M. 5-Hydroxymethylfurfural: A Particularly Harmful Molecule Inducing Toxic Lipids and Proteins? *Molecules*. 2025. Vol. 30. № 19. 3897. DOI: <https://doi.org/10.3390/molecules30193897>
8. Mouhoubi-Tafnine Z., Ouchemoukh S., Bachir bey M., Louaileche H., Tamendjari A. Effect of storage on hydroxymethylfurfural (HMF) and color of some Algerian honey. *International Food Research Journal*, 2018. Vol. 25. № 3. P. 1044–1050.
9. Samarghandian S, Farkhondeh T., Samini F. Honey and Health: A Review of Recent Clinical Research. *Pharmacognosy Research*. 2017. № 9(2). P. 121–127. DOI: 10.4103/0974-8490.204647

10. Shapla U.M., Solayman Md., Alam N., Khalil Md. I., Gan S. H. 5-Hydroxymethylfurfural (HMF) levels in honey and other food products: effects on bees and human health. *Chemistry Central Journal*. 2018. V. 12. 35. DOI: <https://doi.org/10.1186/s13065-018-0408-3>
11. Sharaf El-Din M. G., Farrag A. F. S., Wu L., Huang Y., Wang K. Health benefits of honey: A critical review on the homology of medicine and food in traditional and modern contexts. *Journal of Traditional Chinese Medical Sciences*. 2025. V.12. № 2. P. 147–164. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jtcms.2025.03.015>
12. Tasic A., Pezo L., Loncar B., Pešic M.B., Tešic Ž., Kalaba M. Assessing the Impact of Botanical Origins, Harvest Years, and Geographical Variability on the Physicochemical Quality of Serbian Honey. *Foods*. 2024. 13. 1530. DOI: <https://doi.org/10.3390/foods13101530>
13. Therapeutic Applications of Honey and its Phytochemicals. Vol. 1. / Rehman M. U., Majid S. Springer, 2020. 404 p.
14. Vĳan L. E., Mazilu I. C., Enache C., Enache S., Topală.C.M. Botanical Origin Influence on Some Honey Physicochemical Characteristics and Antioxidant Properties. *Foods*. 2023. Vol.12. № 11. 2134. DOI: <https://doi.org/10.3390/foods12112134>
15. White J. Spectrophotometric method for hydroxymethylfurfural in honey. *Journal of the Association of Official Analytical Chemists*. 1979. Vol. 62. № 3. P. 509–514. DOI: <https://doi.org/10.1093/jaoac/62.3.509>
16. Zappal M., B. Fallico B., Arena E., Verzera A. Methods for the determination of HMF in honey: a comparison. *Food Control*. 2005. Vol. 16. № 3. P. 273–277. DOI: [10.1016/j.foodcont.2004.03.006](https://doi.org/10.1016/j.foodcont.2004.03.006)

#### REFERENCES:

1. Abdi, G. G., Tola, Y. B., & Kuyu, C. G. (2024). Assessment of physicochemical and microbiological characteristics of honey in Southwest Ethiopia: Detection of adulteration through analytical simulation. *Journal of Food Protection*, 87, 1, 100194. DOI: [10.1016/j.jfp.2023.100194](https://doi.org/10.1016/j.jfp.2023.100194)
2. Abraham, K., Gürtler, R., Berg, K., Heinemeyer, G., Lampen, A., & Appel K.E. (2011). Toxicology and risk assessment of 5-Hydroxymethylfurfural in food. *Molecular Nutrition & Food Research*, 55, 667–678. DOI: [10.1002/mnfr.201000564](https://doi.org/10.1002/mnfr.201000564)
3. Bhure, R. A., Alam, M., Nanda, V., Pawar, V. M., & Saxena, S. (2025). Exploring the Impact of Thermal Processing on the Quality Attributes of Honey: A Comprehensive Review. *Journal of Food Process Engineering*, 48, 1. DOI: [10.1111/jfpe.70033](https://doi.org/10.1111/jfpe.70033)
4. Capuano, E., & Fogliano, V. (2011). Acrylamide and 5-hydroxymethylfurfural (HMF): A review on metabolism, toxicity, occurrence in food and mitigation strategies. *LWT- Food Science and Technology*, 44, 4, 793–810. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.lwt.2010.11.002>
5. Council Directive 2001/110/EC of 20 December 2001 relating to honey. Retrieved from <https://eur-lex.europa.eu/eli/dir/2001/110/oj/eng> (accessed on 1 October 2025).
6. Directive 2014/63/EU of The European Parliament and of the Council of 15 May 2014 Amending Council Directive 2001/110/EC Relating to Honey.. Retrieved from: <https://eur-lex.europa.eu/eli/dir/2014/63/oj/eng> (accessed on 1 October 2025).
7. Greilberger, J., Feigl, G., Greilberger, M., Bystrianska, S., & Greilberger, M. (2025). 5-Hydroxymethylfurfural: A Particularly Harmful Molecule Inducing Toxic Lipids and Proteins? *Molecules*, 30, 19, 3897. DOI: <https://doi.org/10.3390/molecules30193897>
8. Mouhoubi-Tafinine, Z., Ouchemoukh, S., Bachir bey, M., Louaileche, H., & Tamendjari, A. (2018). Effect of storage on hydroxymethylfurfural (HMF) and color of some Algerian honey. *International Food Research Journal*, 25, 3, 1044–1050.
9. Rehman, M. U., (ed.) & Majid, S. (ed.) (2020). Therapeutic Applications of Honey and its Phytochemicals. Vol. 1. Springer. 404 p.
10. Samarghandian, S., Farkhondeh, T., & Samini, F. (2017). Honey and Health: A Review of Recent Clinical Research. *Pharmacognosy Research*, 9, 2, 121–127. DOI: [10.4103/0974-8490.204647](https://doi.org/10.4103/0974-8490.204647)
11. Shapla, U. M., Solayman, Md., Alam, N., Khalil, Md. I., & Gan, S. H. (2018). 5-Hydroxymethylfurfural (HMF) levels in honey and other food products: effects on bees and human health. *Chemistry Central Journal*, 12, 35. DOI: <https://doi.org/10.1186/s13065-018-0408-3>
12. Sharaf El-Din, M.G., Farrag, A.F.S., Wu, L., Huang, Y., & Wang, K. (2025). Health benefits of honey: A critical review on the homology of medicine and food in traditional and modern contexts. *Journal of Traditional Chinese Medical Sciences*, 12, 2, 147–164. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jtcms.2025.03.015>
13. Tasic, A., Pezo, L., Loncar, B., Pešic, M.B., Tešic, Ž., & Kalaba, M. (2024). Assessing the Impact of Botanical Origins, Harvest Years, and Geographical Variability on the Physicochemical Quality of Serbian Honey. *Foods*, 13, 1530. DOI: <https://doi.org/10.3390/foods13101530>

14. Vîjan, L. E., Mazilu, I. C., Enache, C., Enache, S., & Topală, C. M.(2023). Botanical Origin Influence on Some Honey Physicochemical Characteristics and Antioxidant Properties. *Foods*, 12, 11, 2134. DOI: <https://doi.org/10.3390/foods12112134>

15. White, J. (1979). Spectrophotometric method for hydroxymethylfurfural in honey. *Journal of the Association of Official Analytical Chemists*, 62, 509–514. DOI: <https://doi.org/10.1093/jaoac/62.3.509>

16. Zappal, M., Fallico, B., Arena, E., & Verzera, A. (2005). Methods for the determination of HMF in honey: a comparison. *Food Control*, 16, 273–277. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.foodcont.2004.03.006>

*Стаття надійшла: 03.11.2025*

*Прийнято: 25.11.2025*

*Опубліковано: 30.12.2025*

УДК 631.416.2:504.3.054

DOI <https://doi.org/10.32782/pcsd-2025-4-3>

**Ольга КИЧКИРУК**

кандидат хімічних наук, доцент кафедри хімії, Житомирський державний університет імені Івана Франка, вул. Університетська, 46, м. Житомир, Україна, 10008

**ORCID:** 0000-0002-0558-1647

**Scopus Author ID:** 15065356500

**Ірина ОНИЩУК**

кандидат біологічних наук, доцент кафедри екології та географії, Житомирський державний університет імені Івана Франка, вул. Університетська, 46, м. Житомир, Україна, 10008

**ORCID:** 0000-0002-2847-8570

**Scopus Author ID:** 57210861282

**Бібліографічний опис статті:** Кичкирук, О., Онищук, І. (2025). Вплив диференційованого антропогенного навантаження на кислотно-основний режим ґрунтів: порівняльний аналіз зон транспортного та промислового впливу. *Проблеми хімії та сталого розвитку*, 4, 18–27, doi: <https://doi.org/10.32782/pcsd-2025-4-3>

## ВПЛИВ ДИФЕРЕНЦІЙОВАНОГО АНТРОПОГЕННОГО НАВАНТАЖЕННЯ НА КИСЛОТНО-ОСНОВНИЙ РЕЖИМ ҐРУНТІВ: ПОРІВНЯЛЬНИЙ АНАЛІЗ ЗОН ТРАНСПОРТНОГО ТА ПРОМИСЛОВОГО ВПЛИВУ

Дослідження базувалося на комплексному хімічному аналізі ґрунтових зразків, відібраних на різній відстані від джерел антропогенного навантаження: ділянки інтенсивного автомобільного руху (автоtrasа Р28) та С33 промислових підприємств. Основними індикаторами для оцінки ступеня деградації ґрунтового покриву та кислотно-основного буферу обрали: актуальну та обмінну кислотність – як показники інтенсивності підкислення внаслідок накопичення обмінних катіонів  $Al^{3+}$  і  $H^+$ , а також гідролітичну кислотність – як інтегральну характеристику потенційної (резервної) кислотності, що визначає потребу в хімічній меліорації та ремедіації.

Результати дослідження ілюструють суттєві відмінності у характері техногенного впливу на кислотно-основний стан ґрунтів у межах двох досліджуваних зон. У приавтомагістральній ділянці зафіксовано інтенсивне та критичне підкислення ґрунтів: мінімальне значення рН (3,98) виявлено на відстані 25 м від узбіччя, що свідчить про глибоку хімічну деградацію ґрунтового поглинального комплексу та високий ризик розвитку алюмінієвої інтоксикації – чинника, небезпечного для більшості сільськогосподарських культур і рослин природних фітоценозів. Значення гідролітичної кислотності (14,71 ммоль-екв/100 г) підтверджують наявність значного резерву кислотності, що обґрунтовує необхідність термінового проведення хімічної меліорації з метою відновлення родючості та мінімізації екологічних ризиків. Крім того, підкислення сприяє підвищенню рухомості токсичних важких металів, що створює загрозу їхнього включення в трофічні ланцюги та забруднення підземних вод у межах придорожніх екотонів.

На відміну від зон, що зазнають транспортного навантаження, ґрунти С33 промислової зони демонструють виражений лужний ефект, імовірно зумовлений викидами промислових підприємств цементної, металургійної або суміжної галузей, що містять значні концентрації сполук кальцію та магнію. Ці сполуки нейтралізують надлишкову кислотність, підвищуючи рН ґрунтового розчину.

Отримані результати мають прикладне значення для систем екологічного моніторингу, агровиробництва та просторового планування. Вони обґрунтовують доцільність впровадження диференційованих підходів до управління ґрунтовими ресурсами: зокрема, створення захисних лісосмуг і реалізація програм вапнування в зонах транспортного впливу, а також моніторинг лужності та потенційної солонцювості в межах промислових територій. Представлені дані можуть слугувати основою для розробки заходів з відновлення деградованих ґрунтів та зниження екологічного навантаження поблизу об'єктів інфраструктури.

**Ключові слова:** кислотність ґрунту, автотранспортні викиди, промислове забруднення ґрунтів, засолення ґрунтів дорожніми реагентами, оцінка екологічного ризику

**Olga KYCHYRUK**

Candidate of Chemical Sciences, Associate Professor at the Department of Chemistry, Ivan Franko Zhytomyr State University, 46 Universytetska str., Zhytomyr, Ukraine, 10008

**ORCID:** 0000-0002-0558-1647

**Scopus Author ID:** 15065356500

**Iryna ONYSHCHUK**

Candidate of Biological Sciences, Associate Professor at the Department of Ecology and Geography, Ivan Franko Zhytomyr State University, 46 Universytetska str., Zhytomyr, Ukraine, 10008

**ORCID:** 0000-0002-2847-8570

**Scopus Author ID:** 57210861282

**To cite this article:** Kychkyruk, O., Onyshchuk, I. (2025). Vplyv dyferentsiiovanoho antropohennoho navantazhennia na kyslotno-osnovnyi rezhym gruntiv: porivnialnyi analiz zon transportnoho ta promyslovoho vplyvu [The impact of differentiated anthropogenic load on the acid-base regime of soils: a comparative analysis of areas of transport and industrial impact]. *Problems of Chemistry and Sustainable Development*, 4, 18–27, doi: <https://doi.org/10.32782/pcsd-2025-4-3>

## THE IMPACT OF DIFFERENTIATED ANTHROPOGENIC LOADING ON THE ACID-BASE REGIME OF SOILS: COMPARATIVE ANALYSIS OF TRANSPORT AND INDUSTRIAL IMPACT ZONES

*The study was based on a comprehensive chemical analysis of soil samples collected at varying distances from sources of anthropogenic pressure: areas of intense vehicular traffic (highway R28) and sanitary protection zones (SPZ) of industrial enterprises. The primary indicators selected to assess the degree of soil cover degradation and acid-base buffering capacity included: actual and exchangeable acidity – as markers of acidification intensity due to the accumulation of exchangeable  $Al^{3+}$  and  $H^+$  cations, and hydrolytic acidity – as an integral characteristic of potential (reserve) acidity that determines the need for chemical amelioration and remediation.*

*The results demonstrate significant differences in the nature of technogenic impact on the acid-base status of soils within the two studied zones. In the roadside area, intensive and critical acidification was recorded: the minimum pH value (3.98) was observed at a distance of 25 meters from the road edge, indicating profound chemical degradation of the soil adsorption complex and a high risk of aluminum toxicity – a factor hazardous to most agricultural crops and native plant communities. The hydrolytic acidity value (14.71 mmol-eq/100 g) confirms a substantial reserve of acidity, justifying the urgent need for chemical amelioration to restore fertility and minimize ecological risks. Furthermore, acidification enhances the mobility of toxic heavy metals, posing a threat of their entry into food chains and contamination of groundwater within roadside ecotones.*

*In contrast to transport-affected zones, soils within the SPZ of the industrial area exhibited a pronounced alkaline effect, likely caused by emissions from cement, metallurgical, or related industries containing high concentrations of calcium and magnesium compounds. These compounds neutralize excess acidity, increasing the pH of the soil solution.*

*The obtained results have practical significance for environmental monitoring systems, agricultural production, and spatial planning. They support the implementation of differentiated approaches to soil resource management, including the establishment of protective forest belts and liming programs in transport-affected areas, as well as monitoring alkalinity and potential solonchicity within industrial territories. The presented data may serve as a basis for developing measures to restore degraded soils and reduce environmental pressure near infrastructure facilities.*

**Keywords:** soil acidity, motor vehicle emissions, industrial soil pollution, soil salinisation by road reagents, environmental risk assessment

**Вступ.** Грунтовий покрив відіграє роль ключового буферного середовища, здатного акумулювати, трансформувати та частково нейтралізувати антропогенні забруднювальні речовини. Його кислотно-основний режим розглядається як один із найоб'єктивніших індикаторів техногенного навантаження. Інтенсифікація автомобільного руху та розширення промислових зон

справляють суттєвий, проте диференційований вплив на хімічні властивості ґрунтів (Бутенко, 2009, с. 17).

В умовах України, де значна частина території представлена природно кислими ґрунтами – зокрема дерново-підзолистими, для яких характерне фонове значення  $pH_{KCl} \approx 4,8$  (Клименко, 2025, с. 255), додаткове антропогенне

підкислення створює комбіноване навантаження на ґрунтову систему. Це призводить до різкого зниження біопродуктивного потенціалу та посилення геохімічних ризиків, зокрема – до підвищення мобільності токсичних елементів, здатних включатися в біогеохімічні цикли та трофічні ланцюги (Пузік, 2012, с. 200)

Визначення активної ( $pH_{H_2O}$ ), обмінної ( $pH_{KCl}$ ) та гідролітичної ( $H_e$ ) кислотності ґрунтів є ефективним і науково обґрунтованим методом моніторингу поточного стану ґрунтового розчину, а також оцінки ступеня виснаження ґрунтового поглинального комплексу (ГПК) і його буферної здатності. Особливу діагностичну цінність має показник обмінної кислотності, що визначається у сольовій витяжці, оскільки він відображає концентрацію протонів та рухомих іонів алюмінію ( $Al^{3+}$ ) – компонентів, які чинять пряму фітотоксичну дію на рослини (Клименко, 2025, с. 256).

Питання якості ґрунтів і впливу антропогенних чинників на їхній хімічний стан перебувають у центрі уваги провідних наукових установ України. Екологічний стан ґрунтового покриву розглядається як один із пріоритетних напрямів сучасного ґрунтознавства, агроекології та системи екологічного моніторингу (Звіт про діяльність Національної академії наук України у 2020 році, 2021, с. 112)

**Аналіз літератури.** Кисотно-основний стан ґрунтів, який визначається показниками рН, є критично важливим екологічним параметром, що залежить від впливу антропогенних чинників, зокрема викидів автотранспорту, дорожнього пилу та промислової діяльності. У межах територій, що зазнають транспортного навантаження виявлено два домінуючі, протилежні за напрямом механізми впливу на рН ґрунтового розчину – закислення та олушення.

Традиційно значущим чинником, що спричиняє закислення ґрунтів поблизу автомагістралей, була дія вихлопних газів автотранспорту, які містять оксиди азоту ( $NO_x$ ) та оксиди сірки ( $SO_x$ ). У атмосфері ці гази вступають у реакцію з водяною парою, утворюючи сильні мінеральні кислоти. Випадаючи у вигляді кислотних опадів, вони проникають у ґрунт і змінюють його хімічний склад (Пономаренко, 2022, с. 19).

Надходження сильних кислот до ґрунтового розчину спричиняє витіснення основних катіонів кальцію ( $Ca^{2+}$ ) і магнію ( $Mg^{2+}$ ) із

ґрунтового-поглинального комплексу (ГПК) та їх заміщення на іони водню ( $H^+$ ) і алюмінію ( $Al^{3+}$ ), що призводить до підвищення обмінної та гідролітичної кислотності (Бутенко, 2009, с. 17). Унаслідок впровадження каталітичних нейтралізаторів та переходу на низькосірчисте паливо, інтенсивність цього механізму закислення в сучасних умовах суттєво зменшилася порівняно з попередніми десятиліттями.

У сучасних умовах інтенсифікації автотранспортного навантаження, ефект олушення (підвищення рН) ґрунтів часто переважає над ефектом закислення, особливо в безпосередній близькості від інтенсивних транспортних магістралей. Зокрема, основним джерелом олушення виступає дорожній пил, що осідає з повітря і є провідним чинником підвищення рН ґрунтового розчину. До складу пилу входять частки зносу дорожнього покриття (цементні, бетонні або асфальтові фрагменти), які мають лужну реакцію, а також реагенти, що застосовуються для боротьби з ожеледицею (деайсінг-матеріали), зокрема хлориди натрію та кальцію. Зазначені солі можуть безпосередньо підвищувати лужність або спричинити вилуговування кислотних іонів, зміщуючи реакцію ґрунту в бік нейтральних або лужних значень рН (Marosz, 2011, с. 50).

Результати досліджень міських ґрунтів, розташованих поблизу жвавих транспортних магістралей (Bartkowiak, 2024, с. 829), демонструють середні значення рН у межах 7,30–7,76 ( $pH_{KCl}$ ), що свідчить про домінування впливу дорожніх матеріалів і солей на хімічний стан ґрунтового середовища.

Різні типи промислових підприємств можуть генерувати викиди з протилежним впливом на кислотно-основний стан ґрунтів, залежно від технологічної специфіки виробництва. Промислові зони, як правило, характеризуються підвищеними значеннями рН (понад 6,5), що свідчить про домінування викидів лужноземельних елементів, зокрема часток вапна, попелу або цементного пилу. Такі компоненти діють як хімічні меліоранти, нейтралізуючи природну кислотність і підтримуючи ґрунти в нейтральному або слаболужному стані.

Дослідження українських науковців, присвячені аналізу придорожніх ґрунтів (Łuczak, 2021, с. 5309), підтверджують загальносвітову тенденцію до підвищення рН (олушення)

поблизу інтенсивних транспортних артерій. У сучасному ґрунтознавстві показник рН розглядається як ключовий модифікатор хімічного стану ґрунтового середовища. Функціонування транспортних магістралей може спричиняти як закислення, так і олушення ґрунтів, залежно від історичного періоду, типу забруднювачів, інтенсивності руху та локальних умов. У сучасних урбанізованих зонах олушення переважає, але в зонах з інтенсивним накопиченням кислотних компонентів (наприклад, поблизу узбіччя) ризик закислення залишається високим. Олушення, спричинене надходженням техногенних матеріалів і дорожнього пилу, має вирішальне значення для змін мобільності забруднювальних речовин і є пріоритетним напрямом сучасних екологічних досліджень.

Підвищення рН ґрунту спричиняє зменшення рухомості важких металів, таких як Pb, Cd, Zn, Cu, та посилює їхнє утримання у верхньому горизонті ґрунтового профілю. Це, своєю чергою, впливає на оцінку екологічної небезпеки, знижуючи ризик міграції токсичних елементів у трофічні ланцюги та водні екосистеми. Хоча більшість наукових публікацій зосереджені на проблематиці забруднення важкими металами, зміни рН є невід'ємною складовою таких досліджень, оскільки саме цей параметр визначає подальшу трансформацію забруднювачів у ґрунтовому середовищі (Denysuk, 2019, с. 134).

**Метою дослідження** є кількісна оцінка та порівняльний аналіз кислотно-основного режиму ґрунтів у зонах, що зазнають впливу двох типів антропогенного навантаження – автотранспортного та промислового. Особлива увага приділяється виявленню домінуючих механізмів хімічної трансформації ґрунтового середовища (закислення чи олушення), їхньому просторовому прояву та екологічним наслідкам.

У межах дослідження виконано низку завдань: визначено показники актуальної ( $\text{pH}_{\text{H}_2\text{O}}$ ), обмінної ( $\text{pH}_{\text{KCl}}$ ) та гідролітичної ( $\text{H}_2$ ) кислотності ґрунтових зразків, відібраних на різних відстанях від ключових джерел техногенного забруднення (автотраса Р28 та санітарно-захисні зони (СЗЗ) промислових підприємств). Проведено кількісну оцінку інтенсивності підкислення ґрунтового покриву за показниками обмінної кислотності, що

відображають накопичення кислотоутворюючих іонів ( $\text{H}^+$ ,  $\text{Al}^{3+}$ ), а також встановлено рівень загальної потенційної кислотності за показником гідролітичної кислотності – для оцінки буферної ємності ґрунтів і визначення потреби у хімічній меліорації.

У результаті дослідження виявлено та охарактеризовано принципові відмінності у характері техногенного впливу на кислотно-основний режим ґрунтів між зонами автотранспортного навантаження та промислової діяльності. Здійснено оцінку ступеня хімічної деградації ґрунтового-поглинального комплексу в зоні автотраси, зокрема в точках екстремального підкислення, де зафіксовано високий ризик розвитку алюмінієвої токсичності. Встановлено потенційно негативний вплив цього чинника на сільськогосподарські культури та природні фітоценози в межах зон критичного підкислення.

**Експериментальна частина.** Об'єктом дослідження виступали змішані ґрунтові зразки, відібрані у двох антропогенно-навантажених зонах Житомирської області. Придорожній коридор автомобільної магістралі Р28 (с. Білоколінка та с. Васьковичі) прогнозовано є зоною імовірного закислення. Відбір проб здійснювався з урахуванням просторового градієнта техногенного впливу: безпосередньо біля узбіччя (0 м; проби П1 та П3) та на відстані 25 м від дорожнього полотна (проби П2 та П4). Друга зона охоплює територію перекриття санітарно-захисних зон кількох промислових підприємств різного профілю (металообробка, переробка полімерів, шкіряне виробництво, виготовлення гнучкої упаковки) в межах міста Житомир. У цій зоні (проби П5–П9) прогнозується можливість як локального закислення, так і залуження ґрунтів залежно від характеру промислових викидів. Змішані ґрунтові зразки відбиралися у випадково визначених точках на різній відстані від основних територій промислових підприємств. Відбір здійснювався з двох горизонтів: поверхневого шару (0–5 см) та з глибини 20 см, що дозволяє оцінити вертикальний розподіл кислотно-основних характеристик. Проби позначено відповідно до майданчиків: П5 – 50 м (майданчик № 1), П6 – 75 м (майданчик № 2), П7 – 100 м (майданчик № 3), П8 – 125 м (майданчик № 4), П9 – 150 м (майданчик № 5).

Вибір точок відбору зумовлений необхідністю аналізу просторового розподілу

забруднювальних речовин у межах різних типів техногенного навантаження. Зразки, відібрані безпосередньо біля автостради, відображають переважно вплив грубодисперсних частинок і продуктів механічного зносу дорожнього покриття, тоді як зразки, відібрані на відстані 25 м, більшою мірою зазнають впливу дрібнодисперсних кислотних аерозолів, що осідають з атмосфери на віддаленіших ділянках. Аналіз проб ґрунту із СЗЗ промислових підприємств необхідний для порівняння кисло-основного режиму з іншими зонами антропогенного навантаження (зокрема, автотранспортною) та для визначення характеру техногенного впливу – чи спричинюють викиди локальне закислення або олужнення ґрунтового середовища.

Для проведення аналізу використовували стандартизований лабораторний посуд та аналітичне обладнання, зокрема: іономір, технічні ваги з точністю до 0,01 г, бюретки об'ємом 25 мл, піпетки Мора на 5 мл та мірні циліндри. Серед реактивів застосовували 1 моль-екв/л розчину хлориду калію (KCl) та ацетату натрію (CH<sub>3</sub>COONa), 0,01 моль-екв/л розчин гідроксиду натрію (NaOH), а також індикатор фенолфталеїн. (Кичкирук, 2023, с. 33).

Усі показники кислотності визначалися потенціометричними та титриметричними методами відповідно до вимог ДСТУ ISO 10390:2001 (Державний стандарт України, 2003, с. 6).

- Активну кислотність (pH<sub>H<sub>2</sub>O</sub>) визначали у водній суспензії: наважку повітряно-сухого ґрунту масою 6,00 г поміщали у склянку, додавали 30 мл дистильованої води (співвідношення ґрунт:розчин – 1:5), збовтували протягом 20 хвилин. Після часткового відстоювання рН вимірювали за допомогою іономіра (Чорний, 2018, с. 122).

- Обмінну кислотність (pH<sub>KCl</sub>) визначали у сольовій витяжці: наважку ґрунту масою 10,00 г обробляли 25 мл 1 М розчину KCl (співвідношення 1:2,5), збовтували протягом 15 хвилин. Розчин KCl виступає екстрагентом, що витісняє обмінні іони H<sup>+</sup> та Al<sup>3+</sup> з ґрунтового-поглинального комплексу, забезпечуючи точнішу оцінку потенційної кислотності та токсичності ґрунту.

- Гідролітичну кислотність (H<sub>2</sub>) визначали титриметричним методом за Каппеном (Городній, 2005, с. 152): наважку ґрунту масою 40,00 г обробляли 100 мл 1 М розчину ацетату натрію, збовтували протягом 30 хвилин. Отриманий фільтрат титрували 0,01 н розчином NaOH у присутності фенолфталеїну. Значення H<sub>2</sub> (у ммоль-екв/100 г ґрунту) розраховували за формулою з урахуванням об'єму титранту (V<sub>NaOH</sub>) та параметрів титрування.

**Результати та їх обговорення.** Порівняльний аналіз показників активної (pH<sub>H<sub>2</sub>O</sub>), обмінної (pH<sub>KCl</sub>) та гідролітичної кислотності (H<sub>2</sub>) дозволяє виявити характер техногенного впливу на кисло-основний режим ґрунтів у двох досліджуваних зонах – придорожній та промисловій. Представлені результати вимірювання активної та обмінної кислотності для всіх відібраних проб (Таблиця 2).

Активна кислотність ґрунту (pH<sub>H<sub>2</sub>O</sub>), що визначається як негативний логарифм концентрації іонів водню (H<sup>+</sup>) у ґрунтовому розчині, є ключовим показником, який дозволяє об'єктивно оцінити хімічні умови середовища для рослин і мікроорганізмів. Вона безпосередньо впливає на біологічну доступність елементів живлення, а отже – на загальну родючість ґрунту. У межах санітарно-захисних зон підприємств значення рН у відібраних пробах

Таблиця 1

**Опис відібраних проб ґрунтів**

Проба	Місце відбору	Локація (джерело впливу)	Відстань до джерела, м
П1	с. Білоколінка	Транспорт (Траса Р28)	0
П2	с. Білоколінка	Транспорт (Траса Р28)	25
П3	с. Васьковичі	Транспорт (Траса Р28)	0
П4	с. Васьковичі	Транспорт (Траса Р28)	25
П5	м. Житомир	СЗЗ підприємств	50
П6	м. Житомир	СЗЗ підприємств	75
П7	м. Житомир	СЗЗ підприємств	100
П8	м. Житомир	СЗЗ підприємств	125
П9	м. Житомир	СЗЗ підприємств	150

варіюють від слабокислих (П8 – 6,62) до слаболужних (П7 – 7,16; П9 – 7,05), що свідчить про неоднорідність ґрунтових умов на дослідженій території. Значення рН у всіх пробах нижче нейтрального рівня (рН = 7,0), що свідчить про кислу реакцію ґрунтового середовища. У зоні автотранспортного навантаження (придорожній коридор траси Р28) зафіксовано виражене підкислення ґрунтів, особливо на відстані 25 м від узбіччя. Найвищий показник активної кислотності (П1 – 6,14) зафіксовано безпосередньо біля траси, що може бути наслідком локального впливу дорожніх викидів, зокрема карбонатних частинок, які частково нейтралізують кислотність. Найнижчі значення (П2 – 5,71 та П4 – 5,77) спостерігаються на відстані 25 м від траси, що може свідчити про менший антропогенний вплив або накопичення органічних кислот у ґрунті.

Загалом, усі значення активної кислотності ґрунтового розчину з проб відібраних поблизу траси, знаходяться в межах від слабокислої до кислої реакції, що може: обмежувати доступність макроелементів (особливо фосфору, кальцію, магнію); підвищувати рухливість потенційно токсичних мікроелементів (Fe, Mn, Al); впливати на мікробіоту ґрунту та структуру фітоценозу (табл. 2).

Обмінна кислотність ґрунту ( $pH_{KCl}$ ) є важливим показником його буферної здатності та катіонно-аніонного складу, що безпосередньо впливає на агрохімічний стан і родючість. Вона визначає рівень доступності мінеральних поживних речовин для рослинних і мікробних систем, зокрема катіонів калію ( $K^+$ ), натрію ( $Na^+$ ), а також нітрат ( $NO_3^-$ ) і фосфат ( $PO_4^{3-}$ ) аніонів.

За умов підвищеної кислотності ґрунту спостерігається зниження доступності азот- і фосфорвмісних сполук, що обмежує їх засвоєння рослинами. Водночас зростає рухливість мікроелементів, таких як залізо (Fe), марганець (Mn) та алюміній (Al), що за певних концентрацій може призводити до фітотоксичності. У межах досліджених проб (П1–П4) значення обмінної кислотності ґрунту варіюють у межах рН 3,98–5,58 (табл. 2), що відповідає кислотній реакції ґрунтового розчину. Такий рівень кислотності є нижчим за оптимальний діапазон (рН 6,0–7,5), рекомендований для більшості сільськогосподарських культур рослин, і може свідчити про певне порушення агрохімічного

балансу ґрунтів на дослідженій території. За таких умов можливе зниження доступності основних елементів живлення (зокрема фосфору, кальцію, магнію) та підвищення рухливості потенційно токсичних мікроелементів, що потребує корекційних заходів, зокрема вапнування. Щодо аналізу ґрунтового розчину проб відібраних з території перекриття СЗЗ промислових підприємств, то значення обмінної кислотності варіюють у межах рН 6,68–7,26, що відповідає нейтральній або слаболужній реакції ґрунтового середовища. Такий діапазон вважається оптимальним для більшості сільськогосподарських культур, оскільки забезпечує: високу доступність макроелементів (фосфору, калію, кальцію, магнію); стабільність мікробіологічної активності; мінімальний ризик токсичної дії мікроелементів (Fe, Mn, Al), які зазвичай активні в кислих умовах.

Проби П5 (рН 7,05), П6 (рН 6,94) та П9 (рН 6,88) характеризуються нейтральною реакцією, що є сприятливим показником для ґрунтів, потенційно підданих техногенному навантаженню.

Проба П7 (рН 7,26) має слаболужну реакцію, що може бути наслідком накопичення лужних компонентів, зокрема гідроксидів металів або залишків вапнякових матеріалів, характерних для металообробних або шкіряних виробництв.

Проба П8 (рН 6,68) демонструє слабокислу реакцію, яка все ще залишається в межах допустимих агрохімічних норм, однак може свідчити про локальне підкислення, ймовірно, внаслідок впливу органічних або кислотних стоків.

З урахуванням того, що проби відібрані в межах СЗЗ підприємств, що спеціалізуються на металообробці, шкіряній промисловості та виробництві гнучких упаковок тощо, отримані значення обмінної кислотності можуть відображати комплексний вплив технологічних викидів, зокрема:

- Металообробка – можливе надходження гідроксидів металів, що нейтралізують кислотність;
- Шкіряне виробництво – використання лужних реагентів (наприклад, вапна, сульфідів) може підвищувати рН;
- Виробництво гнучких упаковок – менш агресивне хімічне навантаження, однак можливе локальне накопичення органічних залишків.

**Порівняльні результати активної та обмінної кислотності ґрунтів  
під антропогенним впливом**

Проба	$pH_{H_2O}$	$pH_{KCl}$	$\Delta pH (H_2O-KCl)$	Категорія кислотності (за $pH_{KCl}$ )
П1	6,14	5,03	1,11	Середньоокислий
П2	5,77	3,98	1,79	Сильнокислий
П3	5,91	5,58	0,33	Слабокислий
П4	5,71	4,20	1,51	Сильнокислий
П5	6,97	7,05	-0,08	Нейтральний / Слаболужний
П6	6,83	6,94	-0,11	Нейтральний / Слаболужний
П7	7,16	7,26	-0,10	Слаболужний
П8	6,62	6,68	-0,06	Нейтральний
П9	7,05	6,88	0,17	Нейтральний

Порівняльний аналіз активної та обмінної кислотності ґрунтів під антропогенним впливом свідчать про суттєві відмінності між значеннями активної та обмінної кислотності у пробах, відібраних як у безпосередній близькості до джерел автотранспортного навантаження (0–25 м), так і в межах санітарно-захисних зон підприємств. Проби П1–П4 характеризуються вираженим зниженням рН у розчині КСl порівняно з рН у водній витяжці ( $\Delta pH = 0,33-1,79$ ), що свідчить про високу обмінну кислотність. Найбільша різниця між активною та обмінною кислотністю зафіксована у пробі П2 ( $\Delta pH = 1,79$ ), що вказує на значну кількість обмінних і потенційно токсичних іонів  $H^+$  та  $Al^{3+}$ , здатних вивільнятися з ґрунтового комплексу. Категорії кислотності за  $pH_{KCl}$  варіюють від слабокислої (П3) до сильнокислої (П2, П4), що підтверджує підкислення ґрунтів у зоні безпосереднього впливу антропогенних чинників (транспорт, промислові викиди). Такі умови можуть обмежувати доступність макроелементів (особливо фосфору, кальцію, магнію) та підвищувати ризик токсичності мікроелементів (Fe, Mn, Al). Проби П5–П9 (СЗЗ підприємств) характеризуються тим, що значення  $pH_{KCl}$  переважно перевищують або близькі до  $pH_{H_2O}$ , що відображається у негативних або мінімальних значеннях  $\Delta pH$  (від  $-0,11$  до  $+0,17$ ). Така динаміка свідчить про низьку обмінну кислотність і високу буферну здатність ґрунтів, що характерно для нейтрального або слаболужного середовища. Категорії кислотності за  $pH_{KCl}$  – нейтральна або слаболужна, що є оптимальним агрохімічним режимом для більшості сільськогосподарських культур.

Відсутність значного розриву між активною та обмінною кислотністю вказує на стабільність ґрунтового поглинального комплексу та відсутність надлишку вільних іонів  $H^+/Al^{3+}$ , що є типовим для ґрунтів з меншим техногенним навантаженням або ефективною природною самоочисною здатністю. Таким чином можна робити висновки, що  $\Delta pH$  ( $pH_{H_2O} - pH_{KCl}$ ) є інформативним показником потенційної кислотності: чим вища різниця, тим більша кількість обмінних іонів  $H^+$  у ґрунтовому поглинаючому комплексі. Проби з високим  $\Delta pH$  (П2, П4) потребують корекційних заходів, зокрема вапнування, для нейтралізації кислотності та зниження токсичності. Ґрунти в межах СЗЗ (П5–П9) демонструють стабільний кислотнолужний режим, що свідчить про відносно сприятливий екологічний стан або ефективну буферну здатність ґрунтів у цих зонах.

Гідролітична кислотність ґрунту, як різновид потенційної кислотності, є показником здатності ґрунтового вбирного комплексу накопичувати протони водню ( $H^+$ ) внаслідок гідролізу мінеральних і органічних речовин. Визначення цього параметра дозволяє оцінити буферну ємність ґрунту та його реакційну здатність до нейтралізації кислотних компонентів.

Гідролітична кислотність має прикладне значення у кількох аспектах:

- Прогнозування потреби у вапнуванні – на її основі розраховується кількість нейтралізуючих речовин (зокрема  $CaCO_3$ ), необхідних для корекції кислотнолужного балансу.
- Планування рекультиваційних заходів – показник використовується для обґрунтування заходів з відновлення деградованих

або техногенно порушених земель, зокрема в межах промислових зон.

Таким чином, гідролітична кислотність є індикатором екологічного стану ґрунтів і відіграє важливу роль у формуванні агрохімічної стратегії на територіях із підвищеним техногенним навантаженням. Результати визначення гідролітичної кислотності, представлені у Таблиці 3, включаючи розрахункові значення для транспортних проб на основі об'ємів розчину титранту NaOH.

Отримані дані демонструють виражений контраст у рівнях гідролітичної кислотності між ґрунтами, що зазнають впливу автотранспортної інфраструктури, та ґрунтами промислової зони. Значення  $N_e$  для ґрунтів поблизу автотранспортної магістралі (діапазон 1,55–14,71 ммоль-екв/100 г) на порядки перевищують показники ґрунтів промислової зони. Це підтверджує принципову відмінність у хімічному складі та механізмах кислотного навантаження двох типів антропогенних джерел.

Винятково високе значення гідролітичної кислотності ( $N_e = 14,71$  ммоль-екв/100 г; проба П3) свідчить про надзвичайно високий рівень резервної (буферної) кислотності ґрунту. Такий показник вказує на те, що, незважаючи на можливе стримування активного підкислення (відносна стабільність  $pH_{KCl}$ ), зумовлене буферною ємністю ґрунту (високий вміст органічної речовини або первинних мінералів), запас нейтралізуючих основ є критично виснаженим. Це свідчить про необхідність застосування максимальної розрахункової дози хімічної меліорації для відновлення кислотного-лужного балансу.

Інтенсивне зростання гідролітичної кислотності у ґрунтах транспортної зони є прямим

наслідком хімічної деградації, спричиненої домінуючим кислотним атмосферним навантаженням. Основним джерелом такого навантаження є автотранспортна діяльність, що супроводжується емісією оксидів сірки та азоту, які в атмосфері трансформуються у сірчану та нітратну кислоту. Ці сполуки, потрапляючи в ґрунт, спричиняють вимивання обмінних основ та збільшення концентрації іонів  $H^+$  і  $Al^{3+}$  у ґрунтового розчину.

У контексті сучасних досліджень додатковим фактором підвищення кислотності ґрунтового покриву є вплив бойових дій. Зокрема, вибухові навантаження (наприклад, удари БПЛА) можуть сприяти утворенню нітратної кислоти внаслідок реакції атмосферного азоту з киснем при високих температурах (Khomiak, 2025). Крім того, механічна деструкція ґрунту активізує вивільнення токсичних іонів з алюмосилікатних мінералів, зокрема рухомого алюмінію, який у процесі гідролізу додатково підвищує концентрацію іонів водню.

Аналіз одержаних результатів свідчить, що автотранспортна діяльність є домінуючим джерелом кислотного навантаження, що призводить до виснаження запасу обмінних основ та хімічної деградації придорожніх ґрунтів. Найбільш виражене підкислення зафіксовано на відстані 25 м від дорожнього полотна ( $pH_{KCl}$  3,98 і 4,20 в пробах П2 та П4 відповідно), де осідають дрібнодисперсні кислотні аерозолі. Натомість  $pH$  в П1 та П3 може бути тимчасово вищим через присутність лужних абразивних частинок (наприклад, з дорожнього покриття).

Критичні значення  $pH_{KCl}$  у П2 та П4 спричиняють вивільнення рухомого алюмінію, що є лімітуючим фактором для чутливих

Таблиця 3

**Результати визначення гідролітичної кислотності ґрунтів**  
**Умови аналізу: аліквота фільтрату 5 мл, концентрація луку 0,0111 моль екв/л**

Проба	$V_{NaOH}$ , мл	$N_e$ (ммоль-екв/100 г ґрунту)	Категорія кислотності
П1	2,8	1,55	Дуже слабкокислий
П2	8,2	5,55	Середньокислий
П3	16,5	14,71	Сильнокислий
П4	12,6	6,93	Середньокислий
П5	0,5	0,28	Некислий (Нейтралізований)
П6	0,3	0,17	Некислий (Нейтралізований)
П7	0,4	0,22	Слабокислий (Локальна аномалія)
П8	0,4	0,22	Некислий (Нейтралізований)
П9	0,4	0,22	Некислий (Нейтралізований)

сільськогосподарських культур, таких як ячмінь, кукурудза, соя, для яких оптимальний рН становить 6,0–7,5. Крім того, кисле середовище (особливо при рН < 5,0) значно підвищує рухливість важких металів (Pb, Cd, Ni), що збільшує ризик їх міграції в ґрунтові води та накопичення в рослинній продукції.

Загалом, високі значення гідролітичної кислотності ( $H_2 > 6,0$  ммоль-екв/100 г) однозначно свідчать про високу резервну кислотність і значну потребу ґрунту у вапнуванні. Показник  $H_2$  є кількісною мірою буферної здатності ґрунту проти закислення. Значення  $H_2 = 14,71$  ммоль-екв/100 г (проба ПЗ) демонструє, що ґрунт досяг межі своєї природної нейтралізуючої здатності. Для забезпечення агрохімічної та екологічної безпеки такі ґрунти потребують інтенсивних меліоративних заходів, зокрема внесення вапна у дозах, орієнтованих на нейтралізацію резервної кислотності – приблизно 1,0–1,5 т/га  $CaCO_3$  на кожні 1,0 ммоль-екв  $H_2$ .

#### Висновки

1. Проведене дослідження підтвердило наявність суттєвих відмінностей у характері антропогенного впливу на кислотність ґрунтів: транспортні коридори виступають джерелом інтенсивного підкислення, тоді як в СЗЗ промислової зони демонструється нейтралізуючий

(лужний) ефект, що може бути пов'язано з особливостями технологічних процесів та хімічного складу викидів.

2. Максимальне зниження обмінної кислотності зафіксовано на відстані 25 м від траси Р28, де мінімальне значення рН<sub>KCl</sub> становить 3,98. Це свідчить про глибоку хімічну деградацію ґрунтового поглинального комплексу, що супроводжується високим ризиком алюмінієвої токсичності, особливо для чутливих сільськогосподарських культур.

3. Результати визначення гідролітичної кислотності свідчать, що ґрунти у зоні інтенсивного впливу автотранспорту характеризуються високим рівнем резервної кислотності ( $H_2$  до 14,71 ммоль-екв/100 г), що є індикатором критичного виснаження нейтралізуючого потенціалу ґрунту. Це обґрунтовує необхідність негайного проведення хімічної меліорації, зокрема вапнування, для відновлення родючості та зниження екологічних ризиків.

4. Кисле середовище ґрунтів, сформоване під впливом транспортних викидів, створює умови для підвищення рухливості токсичних важких металів (Pb, Cd, Ni), що посилює загрозу забруднення трофічних ланцюгів та інфільтрації забруднювачів у підземні води придорожніх територій.

#### ЛІТЕРАТУРА:

1. Бутенко О. С., Охарєв В. О. Механізм визначення кількісних характеристик рівня концентрації забруднюючих речовин викидами автомобільного транспорту. *Екологічна безпека та природокористування*. 2009. Вип. 3. С. 14–33.
2. Клименко М. О., Колесник Т. М., Андрощук О. О., Ровна Г. Ф. Динаміка реакції ґрунтового розчину за тривалої післядії вапнування та удобрення на дерново-підзолистому ґрунті. *Таврійський науковий вісник*. 2025. № 142. Ч. 2. С. 255–262. DOI: <https://doi.org/10.32782/2226-0099.2025.142.2.32>
3. Пузік В. К., Бузіна І. М. Вплив техногенезу та сучасного виробництва на агроекологічний стан території. *Вісник ХНАУ. Екологія ґрунтів*. 2012. № 3. С. 199–203.
4. Звіт про діяльність Національної академії наук України у 2020 році. НАН України. Київ : Академперіодика, 2021. 593 с.
5. Пономаренко О. М., Никифоров В. В., Яковенко В. М. Зміни хімічних і мікроморфологічних властивостей ґрунтів Полтавської області України за останні 130 років. *Український географічний журнал*. 2022. 1(117). С. 18–26. DOI: <https://doi.org/10.15407/ugz2022.01.018>
6. Marosz A. Soil pH, electrical conductivity values and roadside leaf sodium concentration at three sites in central Poland. *Dendrobiology*. 2011. 66. P. 49–54.
7. Bartkowiak A. et al. The Impact of Proximity to Road Traffic on Heavy Metal Accumulation and Enzyme Activity in Urban Soils and Dandelion. *Sustainability*. 2024. 16(2). P. 812–832. DOI: <https://doi.org/10.3390/su16020812>
8. Łuczak K. et al. Effect of NaCl road salt on the ionic composition of soils and *Aesculus hippocastanum* L. foliage and leaf damage intensity. *Scientific Reports*. 2021. 11. P. 5309. DOI: <https://10.1038/s41598-021-84541-x>
9. Denysyk H. I., Didura R. V. Accumulation of heavy metals in road landscape engineering systems. *Науковий вісник Херсонського державного університету*. 2019. Вип. 10. С. 130–136. DOI: <https://doi.org/10.32999/ksu2413-7391/2019-10-18>

10. Кичкирук О. Ю. Інструктивно-методичні матеріали до лабораторних занять з дисципліни «Екологічна хімія». Житомир : Вид-во ЖДУ імені Івана Франка, 2023. 48 с.
11. Державний стандарт України. якість ґрунту визначання рН (ISO 10390:1994, IDT). Київ : Держстандарт України. 2003. 14 с.
12. Чорний С. Г. Оцінка якості ґрунтів : навчальний посібник. Миколаїв : МНАУ, 2018. 233 с.
13. Городній М. М., Лісовал А. П., Бикін А. В. та ін. Агрохімічний аналіз : підручник. 2005. Київ : Арістей. 476 с.
14. Khomiak I. V., Onyshchuk I. P., Kychkyruk O. Y., Vakerych M. M., Hasynets Y. S., Schwartau V. V. The impact of strike UAV explosions on soil acidity and vegetation dynamics. *Biosystems Diversity*. 2025. Vol. 33(2). DOI: <https://doi.org/10.15421/012530>

#### REFERENCES:

1. Butenko, O. S., & Okhariev, V. O. (2009). Mekhanizm vyznachennia kilkisnykh kharakterystyk rivnia kontsentratsii zabrudniuiuchykh rehovyn vykydamy avtomobilnoho transportu [Mechanism for determining quantitative characteristics of pollutant concentration levels in motor vehicle emissions. Environmental safety and natural resource use]. *Ekolohichna bezpeka ta pryrodokorystuvannia*, (3), 14–33. [in Ukrainian].
2. Klymenko, M. O., Kolesnyk, T. M., Androshchuk, O. O., & Rovna, H. F. (2025). Dynamika reaktsii gruntovoho rozchynu za tryvaloї pisladii vapnuvannia ta udobrennia na dernovo-pidzolistomu grunti [Dynamics of soil solution reaction during prolonged after-effects of liming and fertilisation on sod-podzolic soil]. *Tavriiskyi naukovyi visnyk*, 142(2), 255–262. DOI: <https://doi.org/10.32782/2226-0099.2025.142.2.32> [in Ukrainian].
3. Puzik, V. K., & Buzina, I. M. (2012). Vplyv tekhnogenezu ta suchasnoho vyrobnytstva na ahroekolohichni stan terytorii [The impact of technogenesis and modern production on the agroecological condition of territories]. *Visnyk KhNAU. Ekolohiia gruntiv*, (3), 199–203. [in Ukrainian].
4. Zvit pro diialnist Natsionalnoi akademii nauk Ukrainy u 2020 rotsi. (2021). NAN Ukrainy. Akademperiodyka. [in Ukrainian].
5. Ponomarenko, O. M., Nykyforov, V. V., & Yakovenko, V. M. (2022). Zminy khimichnykh i mikromorfolohichnykh vlastyvopei gruntiv Poltavskoi oblasti Ukrainy za ostanni 130 rokiv. [Changes in the chemical and micromorphological properties of soils in the Poltava region of Ukraine over the last 130 years]. *Ukrainskyi heohrafichnyi zhurnal*, 1(117), 18–26. DOI: <https://doi.org/10.15407/ugz2022.01.018> [in Ukrainian].
6. Marosz, A. (2011). Soil pH, electrical conductivity values and roadside leaf sodium concentration at three sites in central Poland. *Dendrobiology*, 66, 49–544
7. Bartkowiak, A. et al. (2024). The Impact of Proximity to Road Traffic on Heavy Metal Accumulation and Enzyme Activity in Urban Soils and Dandelion. *Sustainability*, 16(2), 812. DOI: <https://doi.org/10.3390/su16020812>
8. Łuczak K. et al. (2021). Effect of NaCl road salt on the ionic composition of soils and *Aesculus hippocastanum* L. foliage and leaf damage intensity. *Scientific Reports*, 11, 5309. DOI: <https://doi.org/10.1038/s41598-021-84541-x>
9. Denysyk, H. I., & Didura, R. V. (2019). Accumulation of heavy metals in road landscape engineering systems. *Naukovyi visnyk Khersonskoho derzhavnoho universytetu*, (10), 130–136. DOI: <https://doi.org/10.32999/ksu2413-7391/2019-10-18>
10. Kychkyruk, O. Yu. (2023). *Instruktyvno-metodychni materialy do laboratornykh zaniat z dystsypliny “Ekolohichna khimiia”*. Vyd-vo ZhDU imeni Ivana Franka. [in Ukrainian].
11. Derzhavnyi standart Ukrainy. (2003). Yakist gruntuv vyznachannia pH (ISO 10390:1994, IDT). Derzhstandart Ukrainy. [in Ukrainian].
12. Chornyi, S. H. (2018). *Otsinka yakosti gruntiv [Soil quality assessment]* : navchalnyi posibnyk. MNAU.
13. Horodnii, M. M., Lisoval, A. P., Bykin, A. V. ta in. (2005). *Ahrokhimichniy analiz [Agrochemical analysis]* : pidruchnyk. Aristei.
14. Khomiak, I. V., Onyshchuk, I. P., Kychkyruk, O. Y., Vakerych, M. M., Hasynets, Y. S., & Schwartau, V. V. (2025). The impact of strike UAV explosions on soil acidity and vegetation dynamics. *Biosystems Diversity*, 33(2). DOI: <https://doi.org/10.15421/012530>

Стаття надійшла: 21.11.2025

Прийнято: 07.12.2025

Опубліковано: 30.12.2025

УДК 544.72

DOI <https://doi.org/10.32782/pcsd-2025-4-4>

**Вікторія ЛОВЧИЦЬКА**

лаборант кафедри фізичної та колоїдної хімії, Львівський національний університет імені Івана Франка, вул. Університетська, 1, м. Львів, Україна, 79000

**ORCID:** 0009-0005-4932-780X

**Ярослав КОВАЛИШИН**

доцент кафедри фізичної та колоїдної хімії, Львівський національний університет імені Івана Франка, вул. Університетська, 1, м. Львів, Україна, 79000

**ORCID:** 0000-0002-0373-1832

**Бібліографічний опис статті:** Ловчицька, В., Ковалишин, Я. (2025). Модифікація графітової поверхні відновленням діазосоли та її вплив на змочуваність. *Проблеми хімії та сталого розвитку*, 4, 28–34, doi: <https://doi.org/10.32782/pcsd-2025-4-4>

## ДОСЛІДЖЕННЯ ЗМОЧУВАНІСТІ ГРАФІТОВОЇ ПОВЕРХНІ, МОДИФІКОВАНОЇ ВІДНОВЛЕННЯМ ДІАЗОСОЛІ У ВОДНО-АЦЕТОНІТРИЛЬНОМУ РОЗЧИНІ

При отриманні композитних матеріалів на основі графіту та електропровідних полімерів важливим є забезпечити добру взаємодію між компонентами, що дає змогу покращити властивості таких матеріалів. Цього можна досягти ще на етапі підготовки синтезу шляхом модифікації графітових поверхонь з метою забезпечення доброї їх змочування розчинами вихідних мономерів. Метою роботи є модифікація поверхні графіту МПГ-7 шляхом відновлення 4-ацетамінофенілдіазоній тетрафторборату у водно-ацетонітрильному розчині під дією гіпофосфіту натрію. Наступним етапом модифікації поверхні є обробка її кислотою з метою гідролізу привитих до поверхні ацетамінофенільних груп з утворенням амінофенільних груп. Досліджено змочуваність модифікованої поверхні розчинами аніліну в соляній кислоті. Для цього визначали крайовий кут змочування використовуючи метод лежачої краплі.

Хімічна модифікація поверхні графіту шляхом відновлення діазонієвої солі суттєво покращує його змочуваність водними розчинами. Навіть у випадку чистої води середнє значення косинуса крайового кута змочування  $\cos \theta = 0,65$ , порівняно з  $\cos \theta = 0,32$  для немодифікованої поверхні. Розчини, які містять лише соляну кислоту характеризуються ще більшими значеннями  $\cos \theta$ , тобто змочують поверхню краще порівняно з водою, і набагато краще порівняно з немодифікованим графітом. Додавання до розчину аніліну спочатку призводить до зменшення  $\cos \theta$ , подальше збільшення концентрації аніліну супроводжується швидким збільшенням косинуса крайового кута змочування. Відповідний мінімум є найглибшим для розчинів з найменшою концентрацією HCl. Для 0,1 н аніліну в 0,5 н HCl значення  $\cos \theta$  є найнижчим з усіх досліджених, але значно вищим, ніж для чистої води. Зі збільшенням концентрації кислоти глибина мінімуму зменшується. Такі результати зумовлені наявністю амінофенільних груп, здатних до утворення водневих зв'язків і протонування в солянокислому розчині аніліну. Як результат спостерігається підвищення гідروفільності поверхні та збільшення роботи адгезії.

Найвищі значення  $\cos \theta$  і, відповідно, найкраща змочуваність модифікованої поверхні спостерігаються для концентрацій соляної кислоти 1,0–2,0 н та аніліну 1,0–2,0 н. Отримані результати підтверджують ефективність модифікації графітової поверхні методом відновлення діазосполук та можуть бути використані при синтезі електропровідних композитів.

**Ключові слова:** графіт, поверхневий натяг, крайовий кут змочування, анілін, адгезія.

**Viktoriya LOVCHYTSKA**

Laboratory Assistant at the Department of Physical and Colloid Chemistry, Ivan Franko National University of Lviv, 1 Universytetska str., Lviv, Ukraine, 79005

ORCID: 0009-0005-4932-780X

**Yaroslav KOVALYSHYN**

Associate Professor at the Department of Physical and Colloid Chemistry, Ivan Franko National University of Lviv, 1 Universytetska str., Lviv, Ukraine, 79005

ORCID: 0000-0002-0373-1832

**To cite this article:** Lovchytska, V., Kovalyshyn, Ya. (2025). Modyfikatsiia hrafitovoi poverkhni vidnovlenniam diazosoli ta yii vplyv na zmochuvanist [Modification of the graphite surface by diazosalt reduction and its influence on wettability]. *Problems of Chemistry and Sustainable Development*, 4, 28–34, doi: <https://doi.org/10.32782/pcsd-2025-4-4>

## MODIFICATION OF GRAPHITE SURFACE BY REDUCTION OF DIAZONIUM SALT AND ITS EFFECT ON WETTABILITY

*When obtaining composite materials based on graphite and electrically conductive polymers, it is important to ensure good interaction between the components, which allows improving the properties of such materials. This can be achieved even at the stage of preparation for synthesis by modifying graphite surfaces in order to ensure their good wetting by solutions of the starting monomers. The aim of the work is to modify the surface of graphite MPG-7 by reducing 4-acetaminophenyldiazonium tetrafluoroborate in an aqueous acetonitrile solution under the action of sodium hypophosphite. The next stage of surface modification is to treat it with acid in order to hydrolyze the acetaminophenyl groups grafted to the surface with the formation of aminophenyl groups. The wettability of the modified surface by solutions of aniline in hydrochloric acid was studied. For this, the contact angle of contact was determined using the lying drop method.*

*Chemical modification of the graphite surface by reducing the diazonium salt significantly improves its wettability by aqueous solutions. Even in the case of pure water, the average value of the cosine of the contact angle is  $\cos \theta = 0.65$ , compared to  $\cos \theta = 0.32$  for the unmodified surface. Solutions containing only hydrochloric acid are characterized by even higher values of  $\cos \theta$ , i.e., they wet the surface better compared to water, and much better compared to unmodified graphite. The addition of aniline to the solution initially leads to a decrease in  $\cos \theta$ , and a further increase in the aniline concentration is accompanied by a rapid increase in the cosine of the contact angle. The corresponding minimum is deepest for solutions with the lowest HCl concentration. For 0.1 N aniline in 0.5 N HCl, the value of  $\cos \theta$  is the lowest of all those studied, but significantly higher than for pure water. With increasing acid concentration, the depth of the minimum decreases. Such results are due to the presence of aminophenyl groups capable of forming hydrogen bonds and protonation in the hydrochloric acid solution of aniline. As a result, an increase in the hydrophilicity of the surface and an increase in the work of adhesion are observed. The highest values of  $\cos \theta$  and, accordingly, the best wettability of the modified surface are observed for concentrations of hydrochloric acid 1.0–2.0 N and aniline 1.0–2.0 N. The results obtained confirm the effectiveness of graphite surface modification by the method of diazo compound reduction and can be used in the synthesis of electrically conductive composites.*

**Keywords:** graphite, surface tension, contact angle, aniline, adhesion, surface modification, wettability.

**Актуальність проблеми.** Формування стабільного міжфазного контакту та забезпечення адгезії між компонентами є важливими вимогами під час отримання композитних матеріалів на основі графіту та електропровідних полімерів. Покращення змочуваності графітових поверхонь розчинами солей аніліну призводить до покращення структури та властивостей таких матеріалів.

Тому модифікація поверхні вуглецевих є перспективним для створення нових гібридних матеріалів, у яких поєднуються висока

електропровідність, хімічна стабільність та механічна міцність (Dhand et al., 2011).

**Аналіз останніх досліджень і публікацій.** Найбільш універсальною формою вуглецю є графіт, завдяки високій електропровідності, здатністю утворювати різні морфології. У сучасних дослідженнях графіт використовується в енергетиці, електроніці та виготовлені електропровідних композитів (Murugan et al., 2021).

Розробка «expanded graphite» показала значний потенціал для застосування в суперконденсаторах, адже поєднує відмінні фізичні,

хімічні та електричні властивості, а також легку механічну будову (Zhang et al., 2022).

Сучасні дослідження демонструють, що модифікація графітових поверхонь арендіазонієвими солями дозволяє вводити нові функціональні групи. Такі сполуки значно покращують змочуваність та адгезію між компонентами.

Наприклад, показано, що модифікація арендіазонієвими солями підвищує кут змочування і зміцнює полімерне покриття на вуглецевих волокнах (Sun et al., 2024, p. 6–9).

Відновлення іонів арендіазонію супроводжується утворенням фенільних радикалів, які хімічно приєднуються до поверхні графіту. У цьому випадку привиті фенільні групи будуть орієнтовані під певним кутом до поверхні, що сприяє адсорбції, зокрема, аніліну. Під час полімеризації аніліну для створення кислотного середовища та допування поліаніліну зазвичай використовують соляну або сірчану кислоту (Konwer S., Pokhrel B, 2010; Wu X., Qi S., He J., Duan G., 2010; Konwer S., Gogoi J., Kalita A., Dolui S. 2011).

Використання діазосполук забезпечує формування стабільних ковалентних зв'язків, що сприяє підвищенню адгезії та контролю змочуваності, впливаючи на морфологію поліанілінових покриттів, синтезованих на таких поверхнях (Li et al., 2024, p. 4–7).

Графіт МПГ-7 належить до дрібнозернистих, високощільних графітів і призначений для роботи під значними механічними та термічними навантаженнями, а також в агресивних середовищах. Він виготовляється методом холодного пресування, що забезпечує високу щільність (~1,8 г/см<sup>3</sup>) та низьку відкриту пористість, роблячи матеріал стійким до термічного та механічного руйнування. Дрібний розмір

зерен (не більше 25 мкм) дозволяє виготовляти деталі з тонкими ребрами, виступами та складними тонкостінними елементами (9).

**Мета дослідження.** Метою роботи було синтезувати 4-ацетамінофенілдіазоній тетрафторборат; провести модифікацію поверхні графіту МПГ-7 шляхом поміщення його у водно-ацетонітрильний розчин, в якому здійснювали процес відновлення діазосоли гіпофосфітом натрію; обробити поверхню кислотою з метою гідролізу привитих до поверхні ацетамінофенільних груп до амінофенільних та дослідити змочуваність такої поверхні розчинами аніліну в соляній кислоті.

**Виклад основного матеріалу дослідження.** Для приготування розчинів використовували анілін (х.ч.), соляну кислоту (х.ч.), дистильовану воду. Готували вихідні розчини аніліну різних концентрацій у 3,0, 2,0, 1,0 та 0,5 н НСІ. Густина досліджуваних розчинів визначали пікнометричним методом, а їх поверхневий натяг – сталагмометричним методом.

Визначали крайовий кут змочування твердої поверхні графіту розчинами аніліну в соляній кислоті. В дослідженнях використовували метод лежачої краплі. На попередньо відшліфовану та очищену поверхню графіту наносили краплину розчину об'ємом 10 мкл. Проводили 5 паралельних вимірювань, поміщаючи краплину розчину на різні ділянки поверхні. Результати паралельних вимірів усереднювали. Проекцію краплин на підкладці фотографують. Висоту та ширину краплі визначають безпосередньо за фотознімком (рис. 1).

Значення косинуса крайового кута змочування обчислюють за формулою:  $\cos \theta = \frac{(d/2)^2 - h^2}{(d/2)^2 + h^2}$ , де  $d$  – ширина основи краплі,  $h$  – висота краплі.

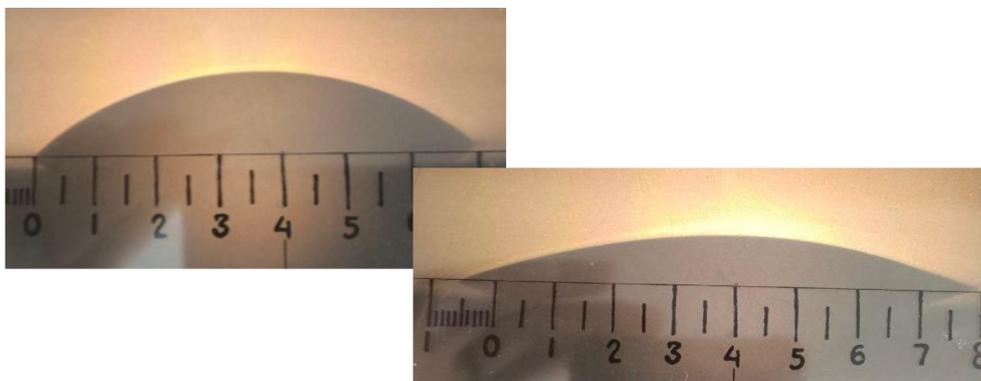


Рис. 1. До визначення крайового кута змочування розчинами солей аніліну графіту марки МПГ-7

Здійснили синтез 4-ацетамінофенілдіазоній тетрафторборату, провели модифікацію поверхні графіту шляхом занурення у 50 мл водного розчину, в якому відбувалось відновлення 3,25 г діазонієвої солі 1,5 г гіпофосфіту натрію. Для очищення поверхні від побічних продуктів реакції її багатократно промивали по чергово етилацетатом та ацетонітрилом. Модифікований ацетамінофенільними групами графіт кип'ятили 30 хв в 10%-вому розчині соляної кислоти з метою гідролізу ацетамінових замісників до амінових.

Результати попередніх досліджень залежності поверхневих натягів розчинів від концентрації аніліну (змінювалась в межах від 0,00 до 2,00 н) та соляної кислоти (від 0,00 до 3,00 н) представлено у роботі (Ковалишин, Ловчицька, 2024). Дослідження змочуваності немодифікованої графітової поверхні відповідними розчинами представлено в роботі (Ковалишин, Ловчицька, 2023).

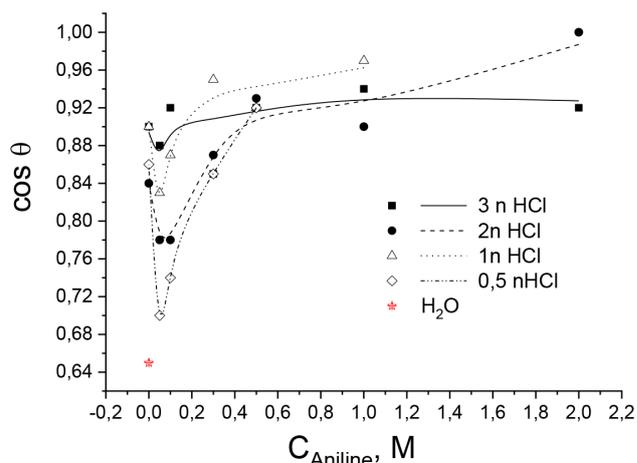
Для розчинів аніліну за достатнього надлишку соляної кислоти зі збільшенням концентрації аніліну спостерігається зменшення поверхневого натягу та покращення змочування поверхні графіту, що підтверджує тенденції, описані у сучасних роботах із поверхневої модифікації графенових та графітових матеріалів (Toledo-Carrillo E, 2024).

Варто зазначити, що навіть за відсутності аніліну для немодифікованого графіту наявність кислоти в розчині призводить до покращення змочуваності поверхні. Пояснити цей факт можна інтеркаляцією хлорид-іонів у поверхневі шари графіту. Відомо, що аніони, зокрема  $Cl^-$ , здатні проникати в міжшаровий простір графіту, змінюючи його поверхневу енергію та крайовий кут змочування. Така аніонна інтеркаляція супроводжується перебудовою електронної структури графітової поверхні та появою полярних центрів, що сприяє притягуванню молекул води (Paraderakis A. A., 2023). Найбільшою мірою цей ефект виявляється в 1 н HCl. Подальше збільшення концентрації кислоти призводить до погіршення змочуваності. Очевидно, в цьому випадку починають домінувати поверхнево-інактивні властивості розчинів соляної кислоти, зумовлені їх великим поверхневим натягом.

При додаванні аніліну спостерігається зростання  $\cos\theta$ , що вказує на покращення

змочування. Цей факт пояснюється з одного боку, поверхнево-активними властивостями розчинів солянокислого аніліну, тобто їх низьким поверхневим натягом. З іншого боку, на поверхні графіту відбуватиметься адсорбція катіона феніламонію. Очевидно, що фенільна група буде орієнтована в бік поверхні, а протонувана амінна група – в бік розчину. Наслідком буде поява електричних зарядів на поверхні, що теж сприятиме міжфазній взаємодії між твердою та рідкою фазами.

Модифікація поверхні графіту суттєво покращила її змочування. На рис. 2. представлено залежності  $\cos\theta$  від концентрації аніліну в розчині за різних концентрацій соляної кислоти. Так, навіть у випадку чистої води середнє значення  $\cos\theta = 0,65$  (порівняно з  $\cos\theta = 0,32$  у випадку немодифікованої поверхні). Розчини, які містять лише соляну кислоту характеризуються ще більшими значеннями  $\cos\theta$ , тобто змочують поверхню краще порівняно з водою, і набагато краще порівняно з немодифікованим графітом. Отримані результати можна пояснити наявністю на поверхні прищеплених амінофенільних груп. Наявність аміногрупи сприятиме виникненню зв'язків з молекулами води. У випадку розчинів, що містять соляну кислоту, відбуватиметься протонування поверхневих аміногруп, що супроводжується набуттям ними позитивного електричного заряду. Наявність електричних зарядів на графітовій поверхні ще більшою мірою покращить взаємодію



**Рис. 2.** Залежність косинуса крайового кута змочування від концентрацій аніліну та соляної кислоти у воді поверхні графіту МПГ-7 модифікованого у водно-ацетонітрильному розчині

з водними розчинами. Утворення заряду на поверхні графіту також може полегшити інтеркаляцію аніонів  $Cl^-$  у міжшаровий простір кристалічної решітки графіту.

Додавання до розчину аніліну концентрацією 0,1 н призводить до зменшення  $\cos \theta$ , причому це зменшення є найрізкішим для розчинів на основі 0,5 н HCl. Для 0,1 н аніліну в 0,5 н HCl значення  $\cos \theta$  є найнижчим з усіх досліджених, але значно вищим, ніж для чистої води. Зі збільшенням концентрації кислоти спадання значень  $\cos \theta$  зменшується і для розчинів, що містять 3 н HCl, відповідний мінімум є дуже слабо виражений. Оскільки поверхневий натяг розчинів та робота когезії (табл. 1) розчинів зменшуються зі збільшенням концентрації аніліну, то погіршення змочуваності зумовлене змінами властивостей поверхні. Пояснити отримані результати можна тим, що на поверхні будуть позитивно та негативно заряджені центри. Позитивними центрами будуть протоновані феніламініні групи. Негативними – полярні

центри, утворені внаслідок інтеркаляції аніонів  $Cl^-$  в міжшаровий простір графіту в тих областях поверхні, де відсутні прищеплені амінофенільні групи. При додаванні аніліну в розчин відбуватиметься адсорбція іонів феніламонію на негативних полярних центрах. При цьому гідрофобна фенільна група буде орієнтуватись в бік розчину, погіршуючи змочуваність поверхні.

В області з більшими концентраціями аніліну  $\cos \theta$  швидко зростає і в області концентрацій 0,5–2,0 н перевищує початкові значення (за відсутності аніліну). Збільшення концентрації аніліну призводить до зменшення кількості вільної кислоти і, як наслідок, зменшення числа негативно заряджених полярних центрів на поверхні графіту. В результаті цього на незаряджених немодифікованих ділянках поверхні зміниться орієнтація адсорбованих іонів феніламонію, як і у випадку немодифікованого графіту змочування буде покращуватись внаслідок того, що

Таблиця 1

**Залежність значень роботи адгезії та когезії від концентрацій аніліну та соляної кислоти у водних розчинах при змочуванні модифікованої поверхні графіту МПГ-7**

Концентрація HCl, н	Концентрація аніліну, н	$W_{адгезії}$ Дж/м <sup>2</sup>	$W_{когезії}$ Дж/м <sup>2</sup>
3,0	2,0	0,107	0,111
3,0	1,0	0,113	0,116
3,0	0,5	0,131	0,136
3,0	0,3	0,125	0,135
3,0	0,1	0,131	0,136
3,0	0,05	0,132	0,140
3,0	0,0	0,131	0,138
2,0	2,0	0,126	0,126
2,0	1,0	0,124	0,130
2,0	0,5	0,123	0,127
2,0	0,3	0,121	0,190
2,0	0,1	0,115	0,129
2,0	0,05	0,115	0,129
2,0	0,00	0,127	0,138
1,0	1,0	0,126	0,128
1,0	0,5	0,131	0,136
1,0	0,3	0,137	0,140
1,0	0,1	0,136	0,145
1,0	0,05	0,136	0,149
1,0	0,00	0,133	0,140
0,5	0,5	0,131	0,136
0,5	0,3	0,126	0,136
0,5	0,1	0,117	0,135
0,5	0,05	0,116	0,136
0,5	0,00	0,132	0,142

вони орієнтуватимуться в бік розчину позитивно зарядженими протонуваними аміногрупами.

Найвищі значення  $i$ , відповідно, найкраще змочування поверхні спостерігається за концентрації соляної кислоти 1,0–2,0 н та аніліну 1,0–2,0 н. Для розчинів, що містять 3 н HCl, зміна концентрації аніліну слабо впливає на змочуваність поверхні, хоча значення  $\cos \theta$  є доволі високими і перебувають в межах 0,92–0,94.

Отримані результати корелюють з розрахованими значеннями робіт адгезії та когезії (табл. 1). Найбільші значення робіт адгезії спостерігаються для 1,0 н та 3,0 н розчинів соляної кислоти.

**Висновки і перспективи подальших досліджень.** У роботі досліджено змочування поверхні графіту МПГ-7 водними розчинами солей аніліну та вплив хімічної модифікації графіту на його поверхневі властивості.

Хімічна модифікація графіту через відновлення діазонієвої солі суттєво покращує його змочуваність водними розчинами. На поверхні

з'являються амінофенільні групи, здатні до утворення водневих зв'язків і протонування в кислому середовищі, що зумовлює підвищення гідрофільності та збільшення роботи адгезії.

Найвищі значення  $\cos \theta$   $i$ , відповідно, найкраща змочуваність модифікованої поверхні спостерігаються для соляної кислоти 1,0–2,0 н та аніліну 1,0–2,0 н. Отримані результати підтверджують ефективність модифікації графітової поверхні методом відновлення діазосполук та можуть бути використані для розробки електропровідних композитів і гібридних вуглецево-полімерних матеріалів із покращеною міжфазною взаємодією.

**Подяка.** Подані у цій статті результати досліджень отримано за фінансової підтримки Міністерства освіти і науки України (№ державної реєстрації держбюджетної теми: 0123U101857 «Фізико-хімія функціональних наноматеріалів для електрохімічних систем»).

This work was partly supported by the Simons Foundation (Award Number: PD-Ukraine-00014574).

#### ЛІТЕРАТУРА:

1. Dhand C., Dwivedi N., Malhotra B. Polyaniline-based biosensors. *Nanobiosensors in Disease Diagnosis*. 2011. 26, 2811–2821. DOI: 10.2147/NDD.S64841
2. Murugan P., Nagarajan R., Shetty B., Govindasamy M., Sundramoorthy A. Recent trends in the applications of thermally expanded graphite for energy storage and sensors – a review. *Nanoscale Advances*. 2021. 6294. DOI: <https://doi.org/10.1039/D1NA00109D>
3. Zhang D., Tan C., Zhang W., Pan W., Wang Q., Li L. Expanded Graphite-Based Materials for Supercapacitors: A Review. *Molecules*. 2022. 27. 716. DOI: <https://doi.org/10.3390/molecules27030716>
4. Sun M., Li X., Liu H., Huang C., Wang K., & Zhao Y. Effect of Electrochemical Aryl Diazonium Salt Modification on Interfacial Properties of CF/PEEK Composites. *Materials*. 2024. 17. 2899. DOI: <https://doi.org/10.3390/ma17122899>
5. Konwer S., Pokhrel B., Dolui S. K. Synthesis and Characterization of Polyaniline/Graphite Composites and Study of Their Electrical and Electrochemical Properties. *Applied Polymer Science*. 2010. 1138–1145. DOI: <https://doi.org/10.1002/app.31633>
6. Wu X., Qi S., He J., Duan G. Polyaniline/Graphite Nanosheets Composites and its Conducting Properties. *Polymers & Polymer Composites*. 2010. Vol. 18. 23–29. DOI: 10.1177/096739111001800103
7. Konwer S., Gogoi J., Kalita A., Dolui S. Synthesis of expanded graphite filled polyaniline composites and evaluation of their electrical and electrochemical properties. *Mater Electron*. 2011. DOI: 10.1007/s10854-010-0276-7
8. Li W., Duan Z., Sun M., et al. Grafting Carbon Fibers with Graphene via a One-Pot Aryl Diazonium Reaction to Refine the Interface Performance of T1100-Grade CF/BMI Composites. *Materials*. 2024. 17. 3288. DOI: 10.3390/ma17133288
9. Graphite. URL: <https://graphite.in.ua/ua/p115810-grafit-mpg.html>
10. Ковалишин Я., Ловчицька В. Дослідження змочування поверхні графіту МПГ-7 водними розчинами солей аніліну. *Вісн. Львів. у-ту. Сер. хімічна*. 2024. 65. С. 335–343. DOI: <http://dx.doi.org/10.30970/vch.6501.335>
11. Ловчицька В., Ковалишин Я. Змочування поверхні графіту розчинами аніліну в соляній кислоті. *Актуальні проблеми хімії, матеріалознавства та екології*. 2023. 83–85.
12. Toledo-Carrillo E., Garcia-Rodriguez M., Morallon E., Cazorla-Amoros D., Ye F. Co-complexes on modified graphite surface for steady green hydrogen production from water at neutral pH. *Frontiers in Chem*. 2024. 1–11. DOI: 10.3389/fchem.2024.1469804
13. Papaderakis A. A., Ejigu A., Yang J., Elgendy A., Radha B., Keerthi A., Juel A., Dryfe R. A. W. Anion intercalation into graphite drives surface wetting. *J. Am. Chem. Soc*. 2023. Vol. 145. 8007–8020. DOI: <https://doi.org/10.1021/jacs.2c13630>

**REFERENCES:**

1. Dhand, C., Dwivedi, N., & Malhotra, B. (2011). Polyaniline-based biosensors. *Nanobiosensors in Disease Diagnosis*, 26, 2811–2821. <https://doi.org/10.2147/NDD.S64841>
2. Murugan, P., Nagarajan, R., Shetty, B., Govindasamy, M., & Sundramoorthy, A. (2021). Recent trends in the applications of thermally expanded graphite for energy storage and sensors: A review. *Nanoscale Advances*, 3, 6294–6314. <https://doi.org/10.1039/D1NA00109D>
3. Zhang, D., Tan, C., Zhang, W., Pan, W., Wang, Q., & Li, L. (2022). Expanded graphite-based materials for supercapacitors: A review. *Molecules*, 27(3), Article 716. <https://doi.org/10.3390/molecules27030716>
4. Sun, M., Li, X., Liu, H., Huang, C., Wang, K., & Zhao, Y. (2024). Effect of electrochemical aryl diazonium salt modification on interfacial properties of CF/PEEK composites. *Materials*, 17(12), Article 2899. <https://doi.org/10.3390/ma17122899>
5. Konwer, S., Pokhrel, B., & Dolui, S. K. (2010). Synthesis and characterization of polyaniline/graphite composites and study of their electrical and electrochemical properties. *Journal of Applied Polymer Science*, 118(2), 1138–1145. <https://doi.org/10.1002/app.31633>
6. Wu, X., Qi, S., He, J., & Duan, G. (2010). Polyaniline/graphite nanosheets composites and its conducting properties. *Polymers & Polymer Composites*, 18(1), 23–29. <https://doi.org/10.1177/096739111001800103>
7. Konwer, S., Gogoi, J., Kalita, A., & Dolui, S. K. (2011). Synthesis of expanded graphite filled polyaniline composites and evaluation of their electrical and electrochemical properties. *Materials Science in Electronics*. <https://doi.org/10.1007/s10854-010-0276-7>
8. Li, W., Duan, Z., Sun, M., et al. (2024). Grafting carbon fibers with graphene via a one-pot aryl diazonium reaction to refine the interface performance of T1100-grade CF/BMI composites. *Materials*, 17(13), Article 3288. <https://doi.org/10.3390/ma17133288>
9. Graphite. (n.d.). *Hrafit MPG* [Graphite MPG]. Retrieved from <https://graphite.in.ua/ua/p115810-grafit-mpg.html>
10. Kovalyshyn, Y., & Lovchytska, V. (2024). *Doslidzhennia zmochuvannia poverkhni hrafitu MPH-7 vodnymy rozchynamy solei anilinu* [Study of wetting of MPG-7 graphite surface by aqueous solutions of aniline salts]. *Visnyk of Lviv University. Chemical Series*, 65, 335–343. <https://doi.org/10.30970/vch.6501.335> [in Ukrainian].
11. Lovchytska, V., & Kovalyshyn, Y. (2023). *Zmochuvannia poverkhni hrafitu rozchynamy anilinu v solianii kysloti* [Wetting of graphite surface by aniline solutions in hydrochloric acid]. *Current Problems of Chemistry, Materials Science and Ecology*, 83–85. [in Ukrainian].
12. Toledo-Carrillo, E., Garcia-Rodriguez, M., Morallon, E., Cazorla-Amoros, D., & Ye, F. (2024). Co-complexes on modified graphite surface for steady green hydrogen production from water at neutral pH. *Frontiers in Chemistry*, 12, Article 1469804. <https://doi.org/10.3389/fchem.2024.1469804>
13. Papaderakis, A. A., Ejigu, A., Yang, J., Elgendy, A., Radha, B., Keerthi, A., Juel, A., & Dryfe, R. A. W. (2023). Anion intercalation into graphite drives surface wetting. *Journal of the American Chemical Society*, 145(14), 8007–8020. <https://doi.org/10.1021/jacs.2c13630>

Стаття надійшла: 25.11.2025

Прийнято: 13.12.2025

Опубліковано: 30.12.2025

УДК 543

DOI <https://doi.org/10.32782/pcsd-2025-4-5>

**Жолт КОРМОШ**

кандидат хімічних наук, професор, професор кафедри хімії та екології, Уманський державний педагогічний університет імені Павла Тичини, вул. Садова, 2, м. Умань, Черкаська обл., Україна, 20300

**ORCID:** 0000-0001-6018-8787

**Scopus Author ID:** 35580134800

**Наталія ГОРБАТЮК**

кандидат педагогічних наук, доцент, завідувач, доцент кафедри хімії та екології, Уманський державний педагогічний університет імені Павла Тичини, вул. Садова, 2, м. Умань, Черкаська обл., Україна, 20300

**ORCID:** 0000-0001-5834-7830

**Юліан ТАРАНЧУК**

директор, Луцький фаховий коледж рекреаційних технологій і права, вул. Промислова, 2, м. Луцьк, Волинська обл., Україна, 43023

**Вадим ТЕСУНОВ**

викладач вищої категорії, викладач – методист циклової комісії з професійної та практичної підготовки, Луцький фаховий коледж рекреаційних технологій і права, викладач кафедри освітніх, педагогічних технологій, ПВНЗ «Академія рекреаційних технологій і права», вул. Промислова, 2, м. Луцьк, Волинська обл., Україна, 43023

**ORCID:** 0009-0006-5833-3096

**Анатолій КРОТ**

викладач вищої категорії, методист циклової комісії з базової та фундаментальної підготовки, Луцький фаховий коледж рекреаційних технологій і права, викладач кафедри освітніх, педагогічних технологій, ПВНЗ «Академія рекреаційних технологій і права», вул. Промислова, 2, м. Луцьк, Волинська обл., Україна, 43023

**ORCID:** 0009-0005-0991-7717

**Валентина КОЦАР**

спеціаліст вищої категорії, викладач-методист, голова циклової комісії фізико-математичних дисциплін, Луцький базовий медичний коледж, вул. Лесі Українки, 2, м. Луцьк, Волинська обл., Україна, 43016

**ORCID:** 0000-0002-6608-7773

**Леонід ГНІТЕЦЬКИЙ**

кандидат наук з фізичного виховання і спорту, доцент, старший викладач кафедри освітніх, педагогічних технологій, ПВНЗ «Академія рекреаційних технологій і права», вул. Промислова, 2, м. Луцьк, Волинська обл., Україна, 43023

**ORCID:** 0000-0002-5677-457X

**Євгеній РОСПОПОВ**

викладач циклової комісії з базової та фундаментальної підготовки, Луцький фаховий коледж рекреаційних технологій і права, викладач кафедри освітніх, педагогічних технологій, ПВНЗ «Академія рекреаційних технологій і права», вул. Промислова, 2, м. Луцьк, Волинська обл., Україна, 43023

**ORCID:** 0000-0002-6067-3907

**Бібліографічний опис статті:** Кормош, Ж., Горбатюк, Н., Таранчук, Ю., Тесунов, В., Крот, А., Коцар, В., Гнітецький, Л., Роспопов, Є. (2025). Екстракційно-фотометричне визначення торасеміду. *Проблеми хімії та сталого розвитку*, 4, 35–41, doi: <https://doi.org/10.32782/pcsd-2025-4-5>

## ЕКСТРАКЦІЙНО-ФОТОМЕТРИЧНЕ ВИЗНАЧЕННЯ ТОРАСЕМІДУ

Методом екстракційно-фотометричного дослідження та комп'ютерного моделювання доказано можливість утворення іонної пари торасеміду (Тор) із катіонним реагентом астрафлосин FF (АФ) утворює іонну пару (ІП). Розраховано та показано енергоефективність утворення ІП, та її дипольний момент. Розрахунки в системі Тор<sup>-</sup> + АФ<sup>+</sup> проводили з використанням пакета «HyperChem 8.0». Використовували різноманітні початкові варіанти розташування протіонів відносно один одного (процедура «single point»). Геометричну оптимізацію іонів проводили методом молекулярної механіки ММ<sup>+</sup>. Досліджені ІП досить добре екстрагуються різними ароматичними вуглеводнями і можуть слугувати ефективною аналітичною формою для екстракційно-фотометричного визначення торасеміду. Встановлено оптимальні умови утворення та екстракції ІП: максимальна екстракція органічним розчинником із водної фази спостерігається при рН 5–9; оптимальним є вміст реагенту у водній фазі в діапазоні  $(1,5-3,0) \cdot 10^{-4}$  М. Оптимальним є час екстракції 50–60 с. Склад ІП встановлено класичними спектрофотометричними методами: зміщення рівноваг та ізоляричних. Показано, що в органічну фазу добре вилучається ІП із співвідношенням компонентів 1:1. Умовний молярний коефіцієнт світлопоглинання ІП в оптимальних умовах сягає  $1,0 \cdot 10^5$ . Градувальний графік залежності оптичної густини екстрактів від концентрації Тор описується рівнянням прямої  $A = 0,011 + 0,052c_{(Тор)}$  в інтервалі концентрацій 0,8–46,8 мкг/см<sup>3</sup> Тор. Межа виявлення Тор, розрахована за 3s-критерієм ( $n = 5$ ;  $P = 0,95$ ), становить 0,7 мкг/см<sup>3</sup>. Розроблена методика екстракційно-фотометричного визначення торасеміду в лікарських формах та біорідинах спортсменів.

**Ключові слова:** торасемід, екстракція, іонна пара, екстракційно-фотометричне визначення.

### **Zholt KORMOSH**

*Candidate of Chemical Sciences, Professor, Professor at the Department of Chemistry and Technology, Lesya Ukrainka Volyn National University, 13 Voli ave., Lutsk, Volyn region, Ukraine, 43025*

**ORCID:** 0000-0001-6018-8787

**Scopus Author ID:** 35580134800

### **Natalia HORBATYUK**

*Candidate of Pedagogic Sciences, Associate Professor, Head, Associate Professor at the Department of Chemistry and Ecology, Pavlo Tychyna Uman State Pedagogical University, 2 Sadova str., Uman, Cherkasy region, Ukraine, 20300*

**ORCID:** 0000-0001-5834-7830

### **Yulian TARANCHUK**

*Director, Lutsk Professional College of Recreational Technologies and Law, 2 Promyslova str., Lutsk, Volyn region, Ukraine, 43023*

### **Vadym TESUNOV**

*Teacher at the Highest Category, Teacher – Methodologist Cycle Committee on Professional and Practical Training, Lutsk Professional College of Recreational Technologies and Law, Teacher at the Department of Educational, Pedagogical Technologies, Academy of Recreational Technologies and Law, 2 Promislova str., Lutsk, Volyn region, Ukraine, 43023*

**ORCID:** 0009-0006-5833-3096

### **Anatolii KROT**

*Teacher at the Highest Category, Cycle Commission on Basic and Fundamental Training, Lutsk Professional College of Recreational Technologies and Law, Teacher at the Department of Educational, Pedagogical Technologies, Academy of Recreational Technologies and Law, 2 Promislova str., Lutsk, Volyn region, Ukraine, 43023*

**ORCID:** 0009-0005-0991-7717

**Valentyna KOTSAR**

*Specialist of the Highest Category, Teacher-Methodologist, Head of the Cyclical Commission of Physics and Mathematics Disciplines, Lutsk Basic Medical College,*

*2 Lesi Ukrainky str., Lutsk, Volyn region, Ukraine, 43016*

**ORCID:** 0000-0002-6608-7773

**Leonid HNITETSKII**

*Associate Professor, Candidate of Sciences in Physical Education and Sports, Senior Teacher at the Department of Educational, Pedagogical Technologies, Academy of Recreational Technologies and Law, 2 Promislova str.,*

*Lutsk, Volyn region, Ukraine, 43023*

**ORCID:** 0000-0002-5677-457X

**Evgeniy ROSPOPOV**

*Teacher at the Cycle Commission for Basic and Fundamental Training, Lutsk Professional College of Recreational Technologies and Law, Teacher at the Department of Educational, Pedagogical Technologies, Academy of Recreational Technologies and Law, 2 Promislova str., Lutsk, Volyn region, Ukraine, 43023*

*Lutsk, Volyn region, Ukraine, 43023*

**ORCID:** 0000-0002-6067-3907

**To cite this article:** Kormosh, Zh., Horbalyuk, N., Taranchuk, Yu., Tesunov, V., Krot, A., Kotsar, V., Hnitetskyi, L., Rospopov, E. (2025). Ekstraktsiino-fotometrychne vyznachennia torasemidu [Extraction-photometric determination of torasemide]. *Problems of Chemistry and Sustainable Development*, 4, 38–41, doi: <https://doi.org/10.32782/pcsd-2025-4-5>

## EXTRACTION-PHOTOMETRIC DETERMINATION OF TORASEMIDE

*The method of extraction-photometric research and computer modeling has proven the possibility of forming an ion pair of torasemide (Tor) with the cationic reagent astrafoxin FF (AF) forming an ion pair (IP). The energy efficiency of IP formation and its dipole moment have been calculated and shown. Calculations in the  $Tor^- + AF^+$  system were performed using the HyperChem 8.0 package. Various initial variants of the counterions' arrangement relative to each other (the "single point" procedure) were used. Geometric optimization of the ions was performed by the molecular mechanics method MM\*. The studied IPs are quite well extracted by various aromatic hydrocarbons and can serve as an effective analytical form for the extraction-photometric determination of torasemide. The optimal conditions for the formation and extraction of IP were established: maximum extraction by an organic solvent from the aqueous phase is observed at pH 5–9; the optimal reagent content in the aqueous phase is in the range  $(1.5–3.0) \cdot 10^{-4}$  M. The optimal extraction time is 50–60 s. The composition of IP was established by classical spectrophotometric methods: equilibrium shift and isomolar series. It is shown that IP with a component ratio of 1:1 is well extracted into the organic phase. The conditional molar light absorption coefficient of IP under optimal conditions reaches  $1.0 \cdot 10^5$ . The calibration graph of the dependence of the optical density of extracts on the Tor concentration is described by the equation of the straight line  $A = 0.011 + 0.052 c_{(Tor)}$  in the concentration range of 0.8–46.8  $\mu\text{g}/\text{cm}^3$  Tor. The detection limit of Tor, calculated by the 3 s criterion ( $n = 5$ ;  $P = 0.95$ ), is 0.7  $\mu\text{g}/\text{cm}^3$ . A method for extraction-photometric determination of torasemide in dosage forms and biofluids of athletes has been developed.*

**Keywords:** torasemide, extraction, ion pair, extraction-photometric determination.

**Вступ.** Торасемід (Тор) (рис. 1), також відомий як торсемід, є сечогінним препаратом з підгрупи петльових діуретиків, який використовується для лікування переважаного рідиною через серцеву недостатність, захворювання нирок і печінки (Торасемід (Torasemidum)). Це менш бажаний метод лікування високого кров'яного тиску. Його приймають всередину, внутрішньо м'язово або шляхом ін'єкції у вену (Torsemide Monograph). Він був запатентований у 1974 році та увійшов у медичне використання

в 1993 році (Fischer, 2006). Він входить до списку основних лікарських засобів Всесвітньої організації охорони здоров'я (World Health Organization, 2021). Він доступний як генеричний (загальний) препарат (British national formulary, 2018).

Торасемід, як сечогінний препарат, використовується не тільки в медицині але й інших галузях, зокрема, у спорті. Відомі випадки, коли спортсмени з метою покращення шансів на перемогу вживали Тор для прискорення

виведення анаболічних стероїдів, психотропних препаратів або інших заборонених препаратів, у зв'язку з цим діуретики були включені до списку заборонених речовин Всесвітньої антидопінгової агенції. Існує чимало випадків, коли спортсменів, зокрема і Українських, дискваліфікували через використання діуретиків (Штригол, 2016; Павлова, 2011; Cadwallader, 2010; Менів; Ventura, 1996).

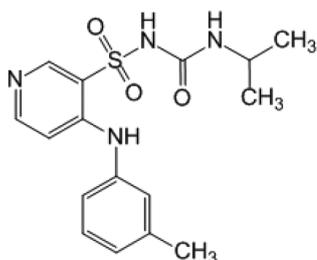


Рис. 1. Графічна формула торасеміду

У зв'язку з широким застосування торасеміду є велика необхідність у надійних методах його визначення.

Для визначення Тор було запропоновано метод високоефективної рідинної хроматографії (ВЕРХ) із електрохімічним детектуванням (Vegoña Barros, 2001). Метод вимагає попередню очищення зразка методом твердофазної екстракції в кислих розчинах з наступною хроматографією. Розділення проводять за допомогою колонки Bondapak C18. Використовується водно-ацетонітрильна рухома фаза (80:20, об./об., рН 3) Детектування проводять амперометрично за допомогою скловуглецевого електроду при +1300 мВ проти Ag–AgCl електрода. Інший метод (ВЕРХ) із ультрафіолетовим детектуванням (Adelaida, 2011). Процедура визначення вимагає ефективну твердофазну екстракцію. Використовували мобільний фази фосфатний буфер/ацетонітрил з колонкою C18 і ультрафіолетовим детектуванням при 288 нм. Відомий спектрофотометричний метод, який заснований на утворенні сполуки синього кольору (Krishna, 2008). Забарвлення виникає коли препарат реагує з реактивом Фоліна-Чокальтеу у лужному середовищі. Кольоровий сполука має максимум поглинання при 760 нм.

Як видно відомі методи визначення торасеміду вимагають попередньої пробопідготовки.

**Мета роботи** – розробити методику визначення Тор та провести апробацію в реальних об'єктах.

**Матеріали та методи дослідження.** Початковий 0,01 М вихідний розчин Тор приготували ретельним розчиненням прецизійної кількості комерційного препарату 0,1 М розчині натрій гідроксиду. Робочі  $1 \cdot 10^{-4}$ – $1 \cdot 10^{-3}$  М розчини приготувували послідовним розбавленням початкового в день проведення дослідження. Водно-спиртовий  $1 \cdot 10^{-3}$  М розчин астрафлосину FF (Jiacheng-Chem Enterprises Ltd., China) приготувували розбавленням прецизійної кількості препарату в водно-етанольному розчині. рН середовища регулювали додаванням універсального буферного розчину, сульфатної кислоти (ч.д.а.) та розчину натрій гідроксиду (ч.д.а.). Іонну силу контролювали 2 М розчином натрій сульфатом (ч.д.а.).

**Апаратура.** Спектрофотометричні вимірювання проводили спектрофотометром СФ-2000 (ЛОМО, Росія) в кварцових кюветах. рН розчинів контролювали потенціометрично іонміром AI 123 (MLsoft Instruments, Україна) зі скляним електродом.

**Методика експерименту.** Іонні пари торасеміду з астрафлосину FF (АФ) вилучали при кімнатній температурі (18–20 °С) у пробірках із притертими корками. Для цього в пробірки вводили досліджуваний розчин, що містить 0–300 мкг Тор, додавали 0,5 см<sup>3</sup> буферного розчину рН 8,5; 0,8 см<sup>3</sup>  $1 \cdot 10^{-3}$  М розчину АФ, 2 см<sup>3</sup> 2 М розчину натрій сульфату і розбавляли водну фазу до 5 см<sup>3</sup> дистильованою водою. Вводили 5 см<sup>3</sup> толуену та вилучали протягом 1 хв. Паралельно проводили холостий дослід. Після поділу фаз екстракти відокремлювали, центрифугували та вимірювали оптичну густину спектрофотометром в кварцових кюветах ( $l = 0,5$  см) при довжині хвилі 546 нм.

**Результати та їх обговорення. Математичне моделювання утворення ІІІ.** Методом математичних розрахунків доказано енергоефективність формування ІІІ. Молекулярне моделювання систем «Тор<sup>-</sup> + АФ<sup>+</sup>» та пов'язані з ним розрахунки проводили з використанням пакета «HyperChem 8.0» для різноманітних початкових варіантів розташування протіонів відносно один одного (процедура «single point»). Геометричну оптимізацію іонів проводили методом молекулярної механіки ММ+.

Теплоту утворення ( $\Delta H_0$ ) іонів та іонної пари «Тор<sup>-</sup> + АФ<sup>+</sup>» визначали напівемпіричним методом РМЗ. Параметри цих методів підібрані

таким чином, щоб вони дозволяли найкращим чином відтворювати експериментальні значення  $\Delta H_0$  органічних сполук. Як приклад у табл. 1 наведені енергетичні характеристики взаємодії «Тор<sup>-</sup> + АФ<sup>+</sup>» та дипольні моменти.

Таблиця 1

**Енергетичні характеристики взаємодії Тор<sup>-</sup> + АФ<sup>+</sup> та дипольні моменти**

Частинка	$E$ , кДж/моль	ДМ
АФ <sup>+</sup>	24 187,0	1,17
Тор <sup>-</sup>	18 994,5	10,81
$\Sigma(\text{Тор}^- + \text{АФ}^+)$	43 271,7	
Тор <sup>-</sup> АФ <sup>+</sup>	43 373,4	67,91
$\Sigma(\text{Тор}^- + \text{АФ}^+) - \text{Тор}^- \text{АФ}^+$	101,7	

Як видно, різниця в енергії утворення іонної пари та суми енергій утворення його компонентів дорівнює 101,7 кДж/моль. Отже, процес утворення ІІ є термодинамічно вигідним. При утворенні ІІ різко зростає дипольний момент порівняно з компонентами.

**Оптимальні умови для екстракції.** Тор є слабкою NH-кислотою ( $pK = 5,9$ ). Аніонна форма переважає вище рН 8. В залежності від рН середовища АФ може існувати у трьох формах – однозарядної іонної ( $R^+$ ), протонованої ( $RH^{2+}$ ) та «гідролізованої» (ROH). Відповідні константи протонування АФ складають:  $pK_1 = -1,18$  (стала протонування) та  $pK_2 = 13,6$  (стала гідролізу) (Bazel, 2002). Реагент АФ у широкому інтервалі рН у водних розчинах переважає у вигляді однозарядної іонної форми, яка характеризується інтенсивним забарвленням: молярний коефіцієнт екстинсії при 540 нм складає  $1,1 \cdot 10^5$ .

Результати експериментального дослідження впливу кислотності водної фази на екстракцію толуолом ІІ Тор з АФ, показало, що рН максимальної екстракції ІІ становить 8–10.

Вивчено вплив концентрації барвника на оптичну густину толуольних екстрактів іонних пар Тор з АФ. Екстракція Тор досягає максимального значення при концентрації АФ  $(1,5-3,0) \cdot 10^{-4}$  М, після чого оптична густина екстрактів практично не змінюється (надлишок реагенту залишається у водній фазі). Рівновага вилучення становить 50–60 с.

Іонні пари досить добре екстрагуються різними ароматичними вуглеводнями. Враховуючи значну токсичність і канцерогенність

бензену, кращими стали *o*-ксилен та толуен. Надалі використовували толуен, тому що при цьому світлопоглинання екстракту холостого досліду є мінімальним.

Стехіометрію ІІ Тор з АФ доказано спектрофотометричними методами ізомолярних серій та зміщення рівноваги; співвідношення компонентів складає 1:1.

Умовний молярний коефіцієнт екстинсії ІІ становить  $1,0 \cdot 10^5$ . Калібрувальний графік залежності оптичного поглинання екстрактів від вмісту Тор можна виразити рівнянням прямої  $A = 0,012 + 0,051 c$  в межах концентрацій 0,7–43,5 мкг/см<sup>3</sup> Тор. Межа виявлення Тор, розрахована за  $3s$ -критерієм ( $n = 5$ ;  $P = 0,95$ ), складає 0,7 мкг/см<sup>3</sup>. Розроблена методика екстракційно-фотометричного визначення Тор в лікарських формах та сечі.

Результати визначення Тор наведено в таблицях 2, 3.

Таблиця 2

**Результати визначення торасеміду в лікарських формах**

Препарат	Вміст згідно специфікації, мг	Знайдено, мг
Торасемід сандоз	100	99 ± 2
Торасемід дарниця	20	20 ± 1
Торасемід тева	10	10 ± 1

Таблиця 3

**Результати визначення торасеміду у сечі спортсменів**

Проба	Введено, мг	Знайдено, мг
1	50	50 ± 2
2	40	40 ± 1
3	100	98 ± 2
4	45	45 ± 1
5	75	75 ± 1

**Висновки.** Доказано, що торасемід з ціаніновим реагентом астрафлосин FF (АФ) утворює стійку іонну пару (ІІ). Методами математичних розрахунків доказано енергоефективність створення ІІ. Максимальне вилучення ІІ з водної фази досягається при рН 8–10. Досліджено вплив концентрації реагенту на оптичну густину толуольних екстрактів іонних пар Тор з АФ. Екстракція ІІ досягає максимального значення при концентрації реагенту  $(1,5-3,0) \cdot 10^{-4}$  М. Рівновага

вилучення сягає 50–60 с. Стехіометрію ІІ Тор з АФ доказано спектрофотометричними методами ізомоларних серій та зміщення рівноваги; співвідношення компонентів складає 1:1. Запропоновано схему утворення та вилучення ІІІ. Умовний молярний коефіцієнт поглинання ІІІ становить  $1,0 \cdot 10^5$ . Калібрувальний графік залежності оптичної густини екстрактів

від концентрації Тор можна описати рівнянням прямої  $A = 0,012 + 0,051 c$  в межах вмісту 0,7–43,5 мкг/см<sup>3</sup> Тор. Межа виявлення Тор, розрахована за 3s-критерієм ( $n = 5$ ;  $P = 0,95$ ), складає 0,7 мкг/см<sup>3</sup>. Запропонована нова методика екстракційно-фотометричного визначення торасеміду в лікарських формах та сечі спортсменів.

#### ЛІТЕРАТУРА:

1. Торасемід (Torasemidum) Діюча речовина: веб-сайт. URL: <https://compendium.com.ua/uk/akt/84/76/torasemidum/> (дата звернення: 20.02.2025).
2. Torsemide Monograph. Medically reviewed by Drugs. com. American Society of Health-System Pharmacists: веб-сайт. URL: <https://www.drugs.com/monograph/torsemide.html> (дата звернення: 20.02.2025).
3. Fischer J., Ganellin C.R. Analogue-based Drug Discovery. *John Wiley & Sons*. 2006.р. 458. ISBN 9783527607495.
4. World Health Organization. World Health Organization model list of essential medicines: 22nd list (2021). Geneva : World Health Organization. WHO/MHP/HPS/EML/2021.02.
5. British national formulary: BNF 76. Pharmaceutical Press. 2018. pp. 227–228. ISBN 9780857113382.
6. Штригол С. Ю. Діуретики. Фармацевтична енциклопедія. Харків : НФУ. 2016.: веб-сайт. URL: <http://www.pharmencyclopedia.com.ua/article/2549/diuretiki>
7. Павлова Ю., Виноградський В. Відновлення у спорті. Монографія. Львів. ЛДУФК. 2011. 204 с.
8. Cadwallader A. B, de la Torre X, Tieri A, Botrè F. The abuse of diuretics as performance-enhancing drugs and masking agents in sport doping: pharmacology, toxicology and analysis. *British Journal of Pharmacology*. 2010;161:1-16. PMID: 20718736. PMCID: PMC2962812. doi: 10.1111/j.1476-5381.2010.00789.x
9. Менів А. Темний бік перемог. Галицький кореспондент. веб-сайт. URL: <https://gk-press.if.ua/x3068/> (дата звернення: 20.02.2025).
10. Ventura R. and Segura J. Detection of Diuretic Agents in Doping Control. *J. Chromatography B: Biomed. Sci. Applic.*, 1996, Vol. 687, No. 1, pp. 127–144. [http://dx.doi.org/10.1016/S0378-4347\(96\)00279-4](http://dx.doi.org/10.1016/S0378-4347(96)00279-4)
11. Begoña Barroso M., Rosa M. Alonso, and Rosa M. Jiménez. Simultaneous Determination of Torasemide and Its Major Metabolite M5 in Human Urine by High-Performance Liquid Chromatography–Electrochemical Detection. *Journal of Chromatographic Science*, 2001. Vol. 39. pp. 491–496. URL: [https://www.academia.edu/95022963/Simultaneous\\_Determination\\_of\\_Torasemide\\_and\\_Its\\_Major\\_Metabolite\\_M5\\_in\\_Human\\_Urine\\_by\\_High\\_Performance\\_Liquid\\_Chromatography\\_Electrochemical\\_Detection?uc-sb-sw=9459746](https://www.academia.edu/95022963/Simultaneous_Determination_of_Torasemide_and_Its_Major_Metabolite_M5_in_Human_Urine_by_High_Performance_Liquid_Chromatography_Electrochemical_Detection?uc-sb-sw=9459746).
12. Adelaida, B. Gamboa, Aragón, Julio, A. Navoni, Cecilia M. Contartese, Alberto R. Villagra, Clara M López, Edda C. Villaamil Lepori. Quantitative Analysis of Torsemide in human plasma by High Performance Liquid Chromatography with ultraviolet detection. *Rev. Mex. Patol. Clin*, 2011. Vol. 58, N. 4, pp 195–200. URL: <http://www.medigraphic.com/patologiaclinica>
13. Krishna M. V., Sankar D. G.. Simple Spectrophotometric Determination of Torsemide in Bulk Drug and in Formulations. *E-Journal of Chemistry*. 2008. Vol. 5. No.3. pp. 473–478. URL: <http://www.e-journals.net>
14. Bazel Ya., Kormosh Zh., Tolmachev A. State of polymethine (styryl and carbocyanine) indolium derivatives in aqueous solution and their analytical properties. *J. Analyt. Chem*, 2002. 57. P. 118–124. <https://doi.org/10.1023/A:1014091218429>.

#### REFERENCES:

1. Torasemid (Torasemidum) Diyuucha rehovyna [Torasemide (Torasemidum) Active ingredient]. Retrieved from: <https://compendium.com.ua/uk/akt/84/76/torasemidum/> (date of application: 20.02.2025). [Ukrainian]
2. Torsemide Monograph. Medically reviewed by Drugs. com. American Society of Health-System Pharmacists. Retrieved from: <https://www.drugs.com/monograph/torsemide.html>. (date of application: 20.02.2025).
3. Fischer, J., Ganellin, C.R. (2006). Analogue-based Drug Discovery. *John Wiley & Sons*. p. 458. ISBN 9783527607495.
4. World Health Organization (2021). World Health Organization model list of essential medicines: 22nd list (2021). Geneva : World Health Organization. WHO/MHP/HPS/EML/2021.02.
5. British national formulary: BNF 76. Pharmaceutical Press. (2018). pp. 227–228. ISBN 9780857113382.
6. Shtrygol, S. Yu. Diuretyky. Farmatsevychna entsyklopediya [Pharmaceutical encyclopedia]. Kh : NFaU; 2016. Retrieved from: <http://www.pharmencyclopedia.com.ua/article/2549/diuretiki> (date of application: 20.02.2025). [Ukrainian].

7. Pavlova, Yu., Vynogradskyy, B. (2011). Vidnovlennya u sporti [Recovery in sports]. Monografiya. L : LDUFK. 204 p. [Ukrainian].
8. Cadwallader, A. B., de la Torre, X., Tieri, A., Botrè, F. (2010). The abuse of diuretics as performance-enhancing drugs and masking agents in sport doping: pharmacology, toxicology and analysis. *British Journal of Pharmacology*. 161. 1–16. PMID: 20718736. PMCID: PMC2962812. doi: 10.1111/j.1476-5381.2010.00789.x
9. Meniv, A. Temnyi bik peremoh. Halytskyi korespondent. [The Dark Side of Victory. Galician Correspondent]. web-site. <https://gk-press.if.ua/x3068/>. (date of application: 20.02.2025). [Ukrainian].
10. Ventura, R., Segura, J. (1996). Detection of Diuretic Agents in Doping Control. *J. Chromatography B: Biomed. Sci. Applic.* 687 (1). 127–144. [http://dx.doi.org/10.1016/S0378-4347\(96\)00279-4](http://dx.doi.org/10.1016/S0378-4347(96)00279-4)
11. Begoña Barroso M., Rosa M. Alonso, and Rosa M. Jiménez. (2001). Simultaneous Determination of Torasemide and Its Major Metabolite M5 in Human Urine by High-Performance Liquid Chromatography–Electrochemical Detection. *Journal of Chromatographic Science*, 39. 491–496. Retrieved from [https://www.academia.edu/95022963/Simultaneous\\_Determination\\_of\\_Torasemide\\_and\\_Its\\_Major\\_Metabolite\\_M5\\_in\\_Human\\_Urine\\_by\\_High\\_Performance\\_Liquid\\_Chromatography\\_Electrochemical\\_Detection?uc-sb-sw=9459746](https://www.academia.edu/95022963/Simultaneous_Determination_of_Torasemide_and_Its_Major_Metabolite_M5_in_Human_Urine_by_High_Performance_Liquid_Chromatography_Electrochemical_Detection?uc-sb-sw=9459746)
12. Adelaida, B. Gamboa, Aragón, Julio, A. Navoni, Cecilia M. Contartese, Alberto R. Villagra, Clara M López, Edda C. Villaamil Lepori. (2011). Quantitative Analysis of Torsemide in human plasma by High Performance Liquid Chromatography with ultraviolet detection. *Rev. Mex. Patol. Clin*, 58 (4). 195–200. Retrieved from <http://www.medigraphic.com/patologiaclinica>
13. Krishna, M. V., Sankar, D. G. (2008). Simple Spectrophotometric Determination of Torsemide in Bulk Drug and in Formulations. *E-Journal of Chemistry*. 5 (3). 473–478. Retrieved from <http://www.e-journals.net>
14. Bazel, Ya., Kormosh, Zh., Tolmachev, A. (2002). State of polymethine (styryl and carbocyanine) indolium derivatives in aqueous solution and their analytical properties. *J. Analyt. Chem.* 57. 118–124. <https://doi.org/10.1023/A:1014091218429>

Стаття надійшла: 12.11.2025

Прийнято: 28.11.2025

Опубліковано: 30.12.2025

УДК 547.853.4:543.429.3

DOI <https://doi.org/10.32782/pcsd-2025-4-6>

**Галина РІЗАК**

кандидат фармацевтичних наук, радник директора Фонду на громадських засадах, Благодійний фонд підтримки освіти, науки, науково-технічної та інноваційної діяльності, м. Ужгород, Україна

**ORCID:** 0000-0002-0230-2366

**Бібліографічний опис статті:** Різак, Г. (2025). Використання ЯМР-спектроскопії для дослідження 2,4-діоксо- та 4-іміно-2-оксо-3-феніл-5-*R*-6-*R'*-тієно[2,3-*d*]піримідинів. *Проблеми хімії та сталого розвитку*, 4, 42–50, doi: <https://doi.org/10.32782/pcsd-2025-4-6>

## ВИКОРИСТАННЯ ЯМР-СПЕКТРОСКОПІЇ ДЛЯ ДОСЛІДЖЕННЯ 2,4-ДІОКСО- ТА 4-ІМІНО-2-ОКСО-3-ФЕНІЛ-5-*R*-6-*R'*-ТІЄНО[2,3-*d*]ПІРИМІДИНІВ

Похідні тієно[2,3-*d*]піримідину є перспективним класом гетероциклічних сполук із широким спектром біологічної активності, що зумовлює необхідність розроблення надійних методів їх структурної ідентифікації. Найбільш інформативним інструментом для встановлення побудови цих сполук є ЯМР-спектроскопія, однак систематизація спектральних даних для 2,4-діоксо- та 4-іміно-2-оксо-похідних залишається недостатньою.

Мета роботи полягає в систематизації та критичному аналізі сучасних досягнень у застосуванні методів ядерного магнітного резонансу для встановлення структури 2,4-діоксо- та 4-іміно-2-оксо-3-феніл-5-*R*-6-*R'*-тієно[2,3-*d*]піримідинів, виявленні закономірностей між хімічними зсувами сигналів та структурними особливостями досліджуваних сполук.

Методи дослідження включають аналіз наукових публікацій, присвячених використанню одно- та двовимірної <sup>1</sup>H та <sup>13</sup>C ЯМР-спектроскопії для ідентифікації та структурної характеристики похідних тієно[2,3-*d*]піримідину, систематизацію спектральних даних залежно від природи замісників у положеннях 2, 3, 4, 5 та 6 піримідинового і тієнового циклів, узагальнення інформації щодо кореляцій між спектральними параметрами та просторовою будовою молекул.

Наукова новизна роботи полягає в комплексному підході до узагальнення спектральних характеристик широкого ряду 2,4-діоксо- та 4-іміно-2-оксо-похідних тієно[2,3-*d*]піримідину, виявлення специфічних особливостей ЯМР-спектрів залежно від електронних ефектів замісників, встановлення діагностичних критеріїв для однозначної ідентифікації структури та конфігурації досліджуваних гетероциклічних систем.

**Висновки.** Проведений аналіз наукових даних свідчить, що ЯМР-спектроскопія є найбільш інформативним методом встановлення структури 2,4-діоксо- та 4-іміно-2-оксо-3-феніл-5-*R*-6-*R'*-тієно[2,3-*d*]піримідинів, що дозволяє точно визначити положення замісників, підтвердити будову гетероциклічної системи та встановити просторову конфігурацію молекул. Систематизація спектральних характеристик створює основу для прогнозування хімічних зсувів нових похідних та оптимізації методів їх синтезу й ідентифікації.

**Ключові слова:** спектральний аналіз, хімічні зсуви, структурна ідентифікація, гетероциклічні сполуки, двовимірні методи.

**Galina RIZAK**

Candidate of Pharmaceutical Sciences, Adviser to the Director of the Foundation (pro bono), Charitable Fund for the Support of Education, Science, Scientific, and Innovative Activities, Uzhhorod, Ukraine

**ORCID:** 0000-0002-0230-2366

**To cite this article:** Rizak, G. (2025). Vykorystannia YaMR-spektroskopii dlia doslidzhennia 2,4-diokso- ta 4-imino-2-okso-3-fenil-5-*R*-6-*R'*-tiieno[2,3-*d*]pirymidyniv [Use of NMR spectroscopy for the study of 2,4-dioxo- and 4-imino-2-oxo-3-phenyl-5-*R*-6-*R'*-thieno[2,3-*d*]pyrimidines]. *Problems of Chemistry and Sustainable Development*, 4, 42–50, doi: <https://doi.org/10.32782/pcsd-2025-4-6>

## USE OF NMR SPECTROSCOPY FOR THE STUDY OF 2,4-DIOXO- AND 4-IMINO-2-OXO-3-PHENYL-5-R-6-R'-THIENO[2,3-d]PYRIMIDINES

*Thieno[2,3-d]pyrimidine derivatives represent a promising class of heterocyclic compounds with a broad spectrum of biological activity, which necessitates the development of reliable methods for their structural identification. Nuclear magnetic resonance (NMR) spectroscopy remains the most informative tool for elucidating the structure of such compounds; however, the systematization of spectral data for 2,4-dioxo- and 4-imino-2-oxo- derivatives is still insufficiently developed.*

*The aim of this study is to systematize and critically analyze current advances in the application of nuclear magnetic resonance methods for determining the structures of 2,4-dioxo- and 4-imino-2-oxo-3-phenyl-5-R-6-R'-thieno[2,3-d]pyrimidines and to identify correlations between the chemical shifts of signals and the structural features of the investigated compounds.*

*The research methods include the analysis of scientific publications devoted to the use of one- and two-dimensional  $^1\text{H}$  and  $^{13}\text{C}$  NMR spectroscopy for the identification and structural characterization of thieno[2,3-d]pyrimidine derivatives, the systematization of spectral data depending on the nature of substituents at positions 2, 3, 4, 5, and 6 of the pyrimidine and thieno rings, and the generalization of information concerning correlations between spectral parameters and the spatial structures of the molecules.*

*The scientific novelty of this study lies in the comprehensive generalization of the spectral characteristics of a wide range of 2,4-dioxo- and 4-imino-2-oxo-thieno[2,3-d]pyrimidine derivatives, the identification of specific features of their NMR spectra depending on the electronic effects of substituents, and the establishment of diagnostic criteria for the unambiguous identification of the structure and configuration of the studied heterocyclic systems.*

**Conclusions.** *The analysis of the available scientific data indicates that NMR spectroscopy is the most informative method for determining the structure of 2,4-dioxo- and 4-imino-2-oxo-3-phenyl-5-R-6-R'-thieno[2,3-d]pyrimidines. It allows for precise identification of substituent positions, confirmation of the heterocyclic system's framework, and determination of the spatial configuration of the molecules. The systematization of spectral characteristics provides a foundation for predicting the chemical shifts of new derivatives and for optimizing the methods of their synthesis and identification.*

**Keywords:** *spectral analysis, chemical shifts, structural identification, heterocyclic compounds, two-dimensional methods.*

**Актуальність проблеми.** Сучасна органічна хімія потребує інноваційних методів структурної ідентифікації нових похідних тієно[2,3-d]піримідину. ЯМР-спектроскопія визначена як найбільш інформативний метод щодо встановлення побудови органічних сполук, проте різні її варіанти ( $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ ,  $^{15}\text{N}$ , двовимірні експерименти) характеризуються різними можливостями структурної ідентифікації (Стрижак, 2022, с. 55).

Розроблення нових похідних тієно[2,3-d]піримідину з досконалими біологічними властивостями (протипухлинною, противірусною та протизапальною активністю) потребує швидкої та надійної структурної характеристики синтезованих сполук (Nadar et al., 2025). Для підтвердження структури таких сполук переважно використовується  $^1\text{H}$  і  $^{13}\text{C}$  ЯМР-спектроскопія, однак спостерігається недостатня систематизація спектральних даних (Frag et al., 2024, с. e2400125).

Важливим є встановлення кореляції між структурою та спектральними параметрами, що визначає подальші напрями досліджень: прогнозування спектральних характеристик нових похідних, оптимізацію методів синтезу та скорочення часу на структурну ідентифікацію.

Систематизація спектральних даних для різних типів замісників у молекулі тієнопіримідину дозволяє створити банк даних характерних хімічних зсувів (Різак, 2016, с. 45–67).

Оптимізації використання ЯМР-спектроскопії для дослідження 2,4-діоксо- та 4-іміно-2-оксо-3-феніл-5-R-6-R'-тієно[2,3-d]піримідинів приділяється недостатньо уваги, що пов'язане з переважною характеристикою лише окремих синтезованих сполук без узагальнення спектральних даних (Rizak, 2023, 2025). Аналіз спектральних параметрів, заснований на виявленні закономірностей впливу структурних факторів на хімічні зсуви сигналів, є ефективним підходом до створення надійних методів ідентифікації нових похідних тієнопіримідину.

**Аналіз останніх досліджень і публікацій.** Фундаментальні роботи, присвячені синтезу та властивостям 2,4-діоксо- та 4-іміно-2-оксо-3-феніл-5-R-6-R'-тієно[2,3-d]піримідинів, узагальнено Різак (2016, с. 78–89), яка визначила ЯМР-спектроскопію як найбільш надійний метод підтвердження структури синтезованих сполук та встановлення реакційної здатності різних положень гетероциклічної системи.

Дослідження Ahmed et al. (2022, с. 3082) присвячено вивченню антимикробної активності нових похідних тієно[2,3-d]піримідину. Автори встановили характерні спектральні параметри для різних типів замісників у положеннях 5 і 6 тієнового кільця, показавши, що введення електронодонорних груп призводить до зміщення сигналів протонів у сильне поле.

У роботі Vlasova et al. (2025) досліджено синтез нових 2,4-діоксо-тієно[2,3-d]піримідинів з антиоксидантними властивостями. Авторами визначено важливість двовимірних експериментів HSQC та HMBC для встановлення зв'язності атомів у складних гетероциклічних системах (Vlasova et al., 2025, с. 48). Спектральні дані для різних типів конденсованих піримідинів систематизували Rashad et al. (2025), визначивши, що використання розчинників різної полярності суттєво впливає на значення хімічних зсувів. Manna et al. (2025) установили діагностичні сигнали для імінної групи ( $\delta$  8,5–9,2 м.ч.) та визначили, що сигнал протону іміногрупи зміщується в слабке поле в разі введення електроноакцепторних замісників.

Своєю чергою Alsouk et al. (2025) використали квантово-хімічні розрахунки методом DFT і встановили суттєву кореляцію між розрахунковими та експериментальними значеннями хімічних зсувів, що дозволяє прогнозувати спектральні характеристики нових похідних до їх синтезу. Проведений аналіз літератури виявив інтенсивний розвиток методів вивчення тієнопіримідинів, проте систематизація спектральних даних саме для 2,4-діоксо- та 4-іміно-2-оксо-3-феніл-5-R-6-R'-тієно[2,3-d]піримідинів залишається недостатньою.

**Виділення не вирішених раніше частин загальної проблеми.** Науковий аналіз показав, що у фаховій літературі бракує системного підходу до узагальнення спектральних характеристик 2,4-діоксо- та 4-іміно-2-оксо-3-феніл-5-R-6-R'-тієно[2,3-d]піримідинів. Переважна більшість досліджень зосереджується на описі спектральних даних окремих синтезованих сполук без глибокого аналізу впливу замісників на параметри ЯМР-спектрів. У наявних публікаціях відсутні узагальнені таблиці характерних хімічних зсувів і констант спінової взаємодії для різних типів замісників, що ускладнює проведення порівняльних досліджень і систематизацію отриманих даних.

Недостатньо вивчені також аспекти використання двовимірної ЯМР-спектроскопії для встановлення просторової побудови 3-феніл-похідних тієно[2,3-d]піримідину. Фактично відсутні дані щодо NOE-ефектів між протонами фенільного замісника та протонами тієнового циклу.

Не досить дослідженим залишається питання впливу розчинників на спектральні характеристики 2,4-діоксо- та 4-іміно-2-оксо-похідних. Систематичний порівняльний аналіз спектрів однакових сполук у різних розчинниках не проводився. Неповною мірою висвітлено аспект використання  $^{15}\text{N}$  ЯМР-спектроскопії для вивчення таутомерних рівноваг і протонування атомів нітрогену в піримідиновому циклі. Також замало використовуються можливості квантово-хімічних розрахунків для прогнозування ЯМР-спектрів.

Актуальними є комплексні дослідження, спрямовані на систематизацію наявних спектральних даних, виявлення загальних закономірностей впливу структурних факторів на параметри ЯМР-спектрів та розроблення практичних рекомендацій щодо ідентифікації 2,4-діоксо- та 4-іміно-2-оксо-3-феніл-5-R-6-R'-тієно[2,3-d]піримідинів.

**Формулювання цілей статті (постановка завдання).** Метою дослідження є систематизація та критичний аналіз застосування методів ЯМР-спектроскопії для встановлення структури 2,4-діоксо- та 4-іміно-2-оксо-3-феніл-5-R-6-R'-тієно[2,3-d]піримідинів і виявлення закономірностей між хімічними зсувами сигналів і структурними особливостями досліджуваних сполук.

Для досягнення поставленої мети визначено такі завдання:

1) проаналізувати сучасні літературні дані щодо використання одновимірних ( $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ ,  $^{15}\text{N}$ ) та двовимірних (COSY, HSQC, HMBC, NOESY) методів ЯМР-спектроскопії для дослідження похідних тієно[2,3-d]піримідину;

2) систематизувати спектральні характеристики (хімічні зсуви, константи спінової взаємодії, мультиплетність сигналів) 2,4-діоксо- та 4-іміно-2-оксо-похідних залежно від природи замісників R та R' у положеннях 5 та 6 тієнового циклу; виявити вплив електронних ефектів фенільного замісника при атомі N-3 на параметри ЯМР-спектрів;

3) узагальнити інформацію щодо впливу розчинників на спектральні характеристики досліджуваних сполук; проаналізувати можливість використання двовимірних методів ЯМР-спектроскопії для встановлення просторової будови та конформаційних переваг молекул;

4) розробити діагностичні критерії для однозначної ідентифікації структури 2,4-діоксо- та 4-іміно-2-оксо-3-феніл-5-R-6-R'-тієно[2,3-d]піримідинів на основі даних ЯМР-спектроскопії.

**Виклад основного матеріалу дослідження з повним обґрунтуванням здобутих наукових результатів.** ЯМР є потужним методом дослідження структури органічних сполук у розчині, який базується на здатності ядер деяких атомів поглинати електромагнітне випромінювання радіочастотного діапазону в разі розміщення зразка в сильному магнітному полі. Частота резонансного поглинання залежить від електронного оточення ядра, що дозволяє отримувати інформацію про хімічну побудову молекули.

Для гетероциклічних сполук найбільш інформативними є  $^1\text{H}$  та  $^{13}\text{C}$  ЯМР-спектри. Протонний магнітний резонанс дозволяє встановити кількість і типи протонів у молекулі, їх взаємне розташування та електронне оточення. Вуглецева ЯМР-спектроскопія надає інформацію про скелет молекули, положення функціональних груп та характер гібридизації атомів карбону.

Основними параметрами ЯМР-спектрів є хімічні зсуви ( $\delta$ ), константи спин-спінової взаємодії (J) та інтегральна інтенсивність сигналів. Хімічний зсув вимірюється в мільйонних частках відносно стандартної речовини (тетраметилсилан) та характеризує електронне оточення ядра. Константи спин-спінової взаємодії відображають взаємний вплив магнітних ядер через хімічні зв'язки.

У  $^1\text{H}$  ЯМР-спектрах 2,4-діоксо-3-феніл-5-R-6-R'-тієно[2,3-d]піримідинів найбільш характерними є сигнали протонів ароматичного фенільного замісника при атомі N-3 та протонів замісників R і R' у положеннях 5 та 6 тієнового циклу. Протони фенільної групи зазвичай резонують у діапазоні  $\delta$  7,2–7,8 м.ч., формуючи мультиплети характерної форми залежно від типу заміщення бензенового кільця (Різак, 2016, с. 52).

За наявності алкільних замісників у положеннях 5 та 6 тієнового циклу спостерігаються характерні сигнали метильних ( $\delta$  1,8–2,5 м.ч.),

метиленових ( $\delta$  2,5–3,2 м.ч.) або метинових ( $\delta$  3,5–4,2 м.ч.) протонів. Хімічні зсуви цих сигналів залежать від електронних ефектів сусідніх груп і стеричних факторів.

Важливою діагностичною ознакою є відсутність сигналів протонів NH-груп у спектрах, зареєстрованих у DMSO- $d_6$ , через швидкий обмін з дейтерієм розчинника. Під час реєстрації спектрів у  $\text{CDCl}_3$  сигнал NH-протону за N-1 зазвичай спостерігається у вигляді розширеного синглету в діапазоні  $\delta$  11,5–12,5 м.ч.

Для 3-феніл-5,6-діметил-тієно[2,3-d]піримідин-2,4-діонів характерні два синглети метильних груп у діапазоні  $\delta$  2,1–2,4 м.ч. Різниця хімічних зсувів між цими сигналами становить 0,1–0,3 м.ч. і зумовлена різним електронним оточенням метильних груп у положеннях 5 та 6.

Головною відмінністю  $^1\text{H}$  ЯМР-спектрів 4-іміно-2-оксо-3-феніл-5-R-6-R'-тієно[2,3-d]піримідинів від спектрів відповідних 2,4-діоксо-похідних є наявність характерного сигналу протону іміногрупи, який зазвичай резонує у вигляді розширеного синглету в діапазоні  $\delta$  8,5–9,5 м.ч. (Різак, 2024).

Хімічний зсув сигналу протону C=NH групи суттєво залежить від електронних ефектів замісників у фенільному кільці при атомі N-3. Електроноакцепторні замісники призводять до зміщення сигналу в слабе поле ( $\delta$  9,0–9,5 м.ч.), тоді як електронодонорні групи спричиняють зміщення в сильне поле ( $\delta$  8,5–8,8 м.ч.).

У спектрах, зареєстрованих у DMSO- $d_6$ , сигнал NH-протону при N-1 спостерігається у вигляді розширеного синглету в діапазоні  $\delta$  11,0–12,0 м.ч. У разі додавання  $\text{D}_2\text{O}$  до розчину зразка сигнали обох NH-протонів зникають унаслідок швидкого водневого обміну.

Таблиця 1

### Характерні діапазони хімічних зсувів у $^1\text{H}$ ЯМР-спектрах похідних тієно[2,3-d]піримідину

Структурний фрагмент	2,4-діоксо-похідні ( $\delta$ , м.ч.)	4-іміно-2-оксо-похідні ( $\delta$ , м.ч.)
NH (N-1) у DMSO- $d_6$	Обмін з розчинником	11,0–12,0
NH (N-1) у $\text{CDCl}_3$	11,5–12,5	11,5–12,5
C=NH	–	8,5–9,5
Феніл (N-3)	7,2–7,8	7,2–7,8
$\text{CH}_3$ (C-5, C-6)	1,8–2,5	1,8–2,5
$\text{CH}_2$ (C-5, C-6)	2,5–3,2	2,5–3,2

$^{13}\text{C}$  ЯМР-спектроскопія надає цінну інформацію про структуру вуглецевого скелету молекул тієнопіримідинів. У  $^{13}\text{C}$  ЯМР-спектрах 2,4-діоксо-3-феніл-5-R-6-R'-тієно[2,3-d]піримідинів найбільш характерними є сигнали атомів карбону карбонільних груп у положеннях 2 та 4.

Сигнал атома карбону C-4 зазвичай резонує в діапазоні  $\delta$  160–165 м.ч., тоді як сигнал C-2 спостерігається за дещо менших значень хімічного зсуву ( $\delta$  150–155 м.ч.). Така різниця зумовлена різним електронним оточенням цих атомів карбону: C-4 знаходиться в  $\alpha$ -положенні до атома сірки тієнового циклу.

Атоми карбону тієнового циклу (C-5, C-6, C-3a, C-7a) резонують у діапазоні  $\delta$  110–140 м.ч. Найбільш сильнопольним є сигнал атома C-5 ( $\delta$  110–120 м.ч.), який знаходиться в  $\alpha$ -положенні до атома сірки та несе алкільний або ариловий замісник R (García-Báez et al., 2022).

Для 4-іміно-2-оксо-похідних характерна наявність сигналу атома карбону іміногрупи C-4 у діапазоні  $\delta$  155–160 м.ч., що є проміжним значенням між хімічними зсувами карбонільних груп та ароматичних атомів карбону. Важливою методикою інтерпретації є використання техніки DEPT, яка дозволяє визначити кратність атомів карбону ( $\text{CH}_3$ ,  $\text{CH}_2$ ,  $\text{CH}$ ,  $\text{C}$ ).

Двовимірні методи ЯМР-спектроскопії є потужним інструментом для встановлення структури складних органічних молекул. Для дослідження 2,4-діоксо- та 4-іміно-2-оксо-3-феніл-5-R-6-R'-тієно[2,3-d]піримідинів найбільш корисними є експерименти COSY, HSQC, HMBC та NOESY.

COSY (Correlation Spectroscopy) виявляє зв'язки між протонами через 2–4 хімічні зв'язки і дозволяє встановити, які протони в молекулі є сусідніми. Для тієнопіримідинів COSY-спектри особливо важливі для встановлення типу заміщення фенільного кільця.

HSQC (Heteronuclear Single Quantum Coherence) встановлює зв'язки між протонами та безпосередньо приєднаними до них атомами  $^{13}\text{C}$  і дозволяє однозначно віднести кожен сигнал у протонному спектрі до відповідного атома карбону.

HMBC (Heteronuclear Multiple Bond Correlation) є ключовим для встановлення структурної зв'язності фрагментів молекули через декілька зв'язків (зазвичай 2–4). HMBC-експерименти підтверджують положення

замісників та структуру конденсованої системи.

NOESY (Nuclear Overhauser Effect Spectroscopy) виявляє просторові взаємодії між протонами, що знаходяться на відстані до 5 Å один від одного. Для 3-феніл-похідних тієно[2,3-d]піримідину NOESY-спектри дозволяють установити взаємну орієнтацію фенільного замісника та тієнового циклу.

Вибір розчинника для реєстрації ЯМР-спектрів суттєво впливає на значення хімічних зсувів та форму сигналів. Для тієнопіримідинів найчастіше використовуються DMSO- $d_6$ ,  $\text{CDCl}_3$ ,  $\text{CD}_3\text{OD}$  та ацетон- $d_6$ .

DMSO- $d_6$  є найбільш універсальним розчинником для полярних гетероциклічних сполук, має високу розчинну здатність і дозволяє реєструвати спектри в широкому діапазоні температур. Однак DMSO- $d_6$  є активним акцептором водневих зв'язків, що призводить до швидкого обміну NH-протонів.

$\text{CDCl}_3$  є менш полярним розчинником, який не викликає обміну NH-протонів. У спектрах, зареєстрованих у  $\text{CDCl}_3$ , зазвичай добре спостерігаються сигнали всіх протонів, однак розчинність деяких полярних тієнопіримідинів може бути недостатньою.

Порівняння спектрів однакових сполук у різних розчинниках свідчить, що хімічні зсуви протонів ароматичних систем змінюються незначно (0,05–0,15 м.ч.), тоді як сигнали протонів, здатних до утворення водневих зв'язків (NH, OH), можуть зміщуватися на 0,5–2,0 м.ч.

Сучасні методи комп'ютерної хімії дозволяють проводити теоретичні розрахунки параметрів ЯМР-спектрів із високою точністю. Найбільш поширеним підходом є використання методів теорії функціоналу густини (DFT) з базисними наборами середнього та великого розміру.

Для розрахунку хімічних зсувів найчастіше використовується функціонал B3LYP у поєднанні з базисними наборами 6-311G(d,p), 6-311++G(d,p) або більшими. Для врахування ефектів розчинника використовуються континуальні моделі розчинника, як-от PCM (Polarizable Continuum Model).

Порівняння розрахункових та експериментальних хімічних зсувів свідчить про високу кореляцію ( $R^2 > 0,95$ ) для протонних спектрів та задовільну кореляцію ( $R^2 > 0,90$ ) для вуглецевих

спектрів. Середня абсолютна похибка розрахунків зазвичай становить 0,2–0,4 м.ч. для  $^1\text{H}$  ЯМР та 2–5 м.ч. для  $^{13}\text{C}$  ЯМР (Alsfook et al., 2025, p. 1418).

Особливо корисними є розрахунки для встановлення структури ізомерів і стереоізомерів, коли експериментальні спектри є складними для інтерпретації. Порівняння експериментальних спектрів з розрахованими для різних можливих структур дозволяє однозначно встановити правильну будову молекули.

На основі проведеного аналізу можна сформулювати практичні рекомендації для дослідників (рис. 1).

Для первинної характеристики синтезованих сполук досить реєстрації одновимірних  $^1\text{H}$  та  $^{13}\text{C}$  ЯМР-спектрів у  $\text{DMSO-d}_6$ . Цей розчинник забезпечує хорошу розчинність

більшості похідних та дозволяє отримати якісні спектри.

Для однозначного встановлення структури складних похідних рекомендується використовувати принаймні один двовимірний експеримент – HSQC або HMBC. Ці методи дозволяють установити зв'язність атомів у молекулі та підтвердити положення замісників. Під час інтерпретації спектрів необхідно враховувати можливість швидкого обміну NH-протонів у полярних розчинниках. Для підтвердження присутності NH-груп рекомендовано провести експеримент із додаванням  $\text{D}_2\text{O}$  до розчину зразка в  $\text{DMSO-d}_6$  та порівняти спектри до та після додавання.

Для встановлення просторової будови молекул доцільною є реєстрація NOESY-спектрів. Особливо корисна інформація про NOE-ефекти

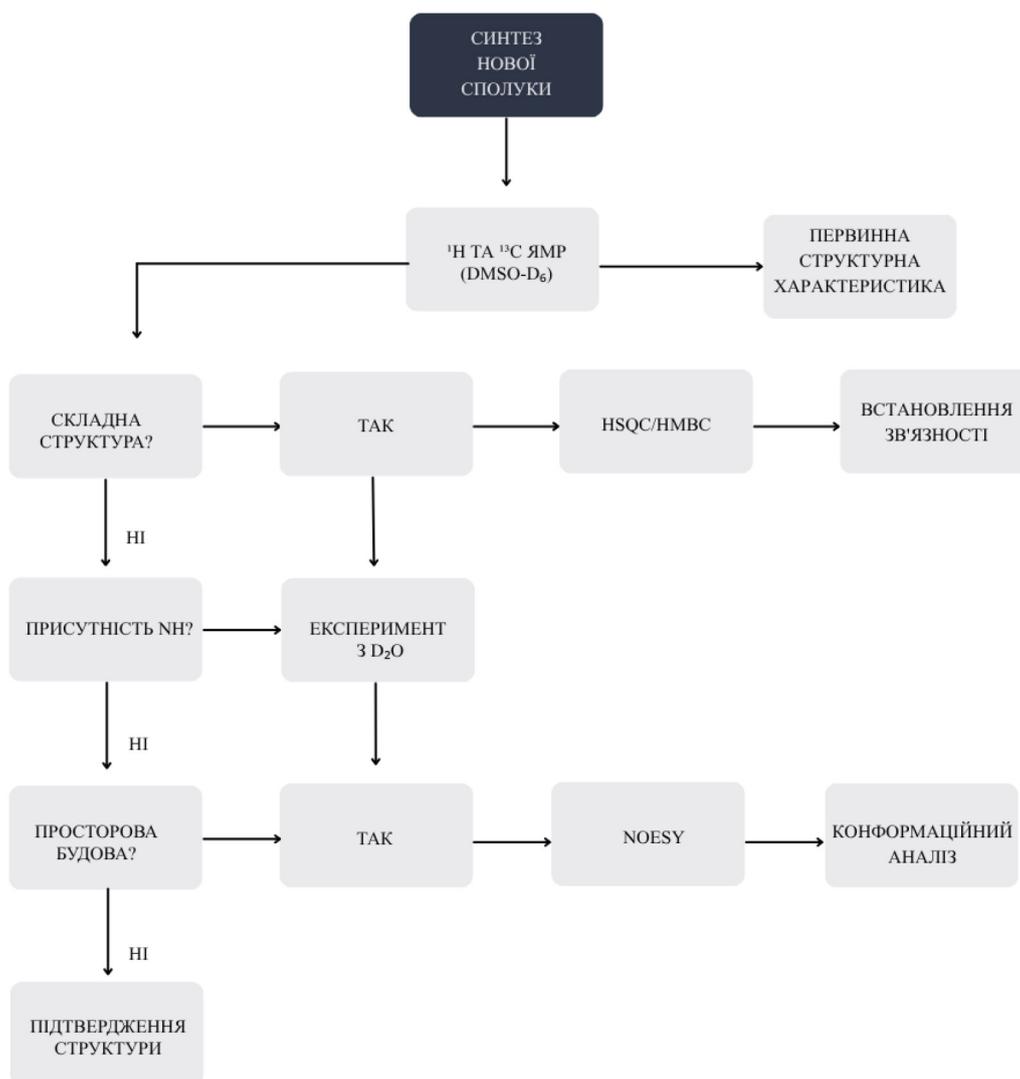


Рис. 1. Схема стратегії використання різних методів ЯМР-спектроскопії для структурної ідентифікації похідних тієно[2,3-d]піримідину

між протонами фенільного замісника та протонами тієнового циклу дозволяє встановити конформаційні переваги молекул.

Порівнюючи спектральні дані з літературними джерелами, необхідно враховувати можливі відмінності в хімічних зсувах, зумовлені використанням різних розчинників, температури реєстрації спектрів та робочої частоти спектрометра. Константи спин-спинової взаємодії є менш чутливими до цих факторів і можуть використовуватися як надійніший критерій порівняння.

**Висновки.** ЯМР-спектроскопія є найбільш інформативним та надійним методом встановлення структури похідних тієно[2,3-d]піримідину, що дозволяє точно визначити положення замісників, підтвердити будову гетероциклічної системи та встановити просторову конфігурацію молекул. Комбіноване використання одновимірних та двовимірних методів забезпечує повну структурну характеристику синтезованих сполук.

Встановлено характерні діапазони хімічних зсувів для ключових структурних фрагментів досліджуваних сполук. Для 2,4-діоксо-похідних характерні сигнали карбонільних атомів карбону в області  $\delta$  150–165 м.ч., протонів фенільного замісника за  $\delta$  7,2–7,8 м.ч., метильних груп за  $\delta$  1.8–2,5 м.ч. Для 4-іміно-2-оксо-похідних діагностичною ознакою є сигнал протону іміногрупи за  $\delta$  8,5–9,5 м.ч.

Виявлено закономірності впливу електронних ефектів замісників на параметри ЯМР-спектрів. Електронодонорні групи викликають зміщення сигналів протонів у сильне поле, тоді як електроноакцепторні замісники призводять до зміщення в слабе поле. Ці ефекти можуть використовуватися для прогнозування спектральних характеристик нових похідних.

Показано важливість вибору розчинника для реєстрації ЯМР-спектрів. DMSO- $d_6$  є найбільш універсальним розчинником для полярних

тієнопіримідинів, однак він викликає швидкий обмін NH-протонів.  $CDCl_3$  дозволяє спостерігати сигнали всіх протонів, але має обмежену розчинну здатність для деяких похідних.

Двовимірні методи ЯМР-спектроскопії (COSY, HSQC, HMBC, NOESY) є необхідними для однозначного віднесення сигналів у складних спектрах і встановлення просторової будови молекул. HMBC-експерименти особливо корисні для підтвердження структури конденсованої гетероциклічної системи, тоді як NOESY-спектри дозволяють установити конформаційні переваги.

Квантово-хімічні розрахунки параметрів ЯМР-спектрів методами DFT дозволяють прогнозувати спектральні характеристики нових похідних із високою точністю та можуть використовуватися для підтвердження структури синтезованих сполук.

Систематизація спектральних характеристик 2,4-діоксо- та 4-іміно-2-оксо-3-феніл-5-R-6-R'-тієно[2,3-d]піримідинів створює надійну основу для ідентифікації нових похідних та оптимізації методів їх синтезу. Розроблені діагностичні критерії дозволяють швидко та однозначно встановлювати структуру синтезованих сполук на основі комплексного аналізу ЯМР-спектральних даних.

*Перспективи подальших досліджень* включають розширення бази даних спектральних характеристик для похідних з новими типами замісників, детальне вивчення таутомерних рівноваг методом  $^{15}N$  ЯМР-спектроскопії, розроблення методів автоматизованої інтерпретації спектрів із використанням машинного навчання та створення онлайн-баз даних спектральної інформації для тієнопіримідинів.

**Подяка.** Авторка висловлює особливу подяку академіку НАН України, д. фарм. н., д. хім. н., проф. В. П. Черних, д. хім. н., проф. Л. А. Шемчуку, д. хім. н., проф. С. М. Хрипаку за багаторічні наукові консультації.

#### ЛІТЕРАТУРА:

1. Різак Г. В. Синтез, фізико-хімічні та біологічні властивості 2,4-діоксо- та 4-іміно-2-оксо-3-феніл-5-R-6-R'-тієно[2,3-d]піримідинів: монографія. Київ : Наукова думка, 2016. 112 с. URL: <https://dspace.uzhnu.edu.ua/jspui/handle/lib/52778> (дата звернення: 17.10.2025).
2. Стрижак Д. О. ЯМР-спектроскопія як метод дослідження будови органічних сполук. *XV Менделєєвські читання: збірник наукових праць Всеукраїнської науково-практичної конференції* (Полтава, 2 берез. 2022 р.). Полтава: Редакційно-видавничий відділ ПНПУ ім. В. Г. Короленка, 2022. С. 55–56. URL: <http://dspace.pnpu.edu.ua/handle/123456789/18860> (дата звернення: 17.10.2025).

3. Nadar S. S., Gawas P. P., Kumbhar N. M., Salunke-Gawali S. Thienopyrimidine: Unveiling the versatile potential of a promising heterocyclic scaffold in drug discovery. *Chemical Biology & Drug Design*. 2025. Vol. 105, No. 6. P. e70146. URL: <https://doi.org/10.1111/cbdd.70146> (date of access: 17.10.2025).
4. Rizak G. Use of NMR Spectroscopy for Studying 2,4-Dioxo- and 4-Imino-2-oxo-3-phenyl-5-R-6-R'-thieno[2,3-d]pyrimidines. *Futurity Proceedings*. 2025. Vol. 2. URL: <https://doi.org/10.5281/zenodo.15207569> (date of access: 17.10.2025).
5. Farag M. A., Kandeel M. M., Kassab A. E., Faggal S. I. Medicinal attributes of thienopyrimidine scaffolds incorporating the aryl urea motif as potential anticancer candidates via VEGFR inhibition. *Archiv der Pharmazie*. 2024. Vol. 357, No. 8. P. e2400125. URL: <https://doi.org/10.1002/ardp.202400125> (date of access: 17.10.2025).
6. Різак Г. В. Вивчення процесів ацилювання 2,4-діоксо- та 4-іміно-2-оксо-3-феніл-5-R-6-R'-тієно[2,3-d]піримідинів. *Український журнал природничих наук*. 2024. № 9. С. 133–139. URL: <https://doi.org/10.32782/naturaljournal.9.2024.13> (дата звернення: 17.10.2025).
7. Alsouk A. A., Othman I. M., Anwar M. M., Saleh A., Nossier E. S. Design, synthesis, and in silico studies of new quinazolinones tagged thiophene, thienopyrimidine, and thienopyridine scaffolds as antiproliferative agents with potential p38 $\alpha$  MAPK kinase inhibitory effects. *RSC Advances*. 2025. Vol. 15, No. 2. P. 1407–1424. URL: <https://doi.org/10.1039/D4RA06744D> (date of access: 17.10.2025).
8. Rizak G. V. Search for biologically active substances using the example of 2,4-dioxo- and 4-imino-2-oxo-3-phenyl-5-R-6-R'-thieno[2,3-d]pyrimidines, prospects for their use in pharmacy and medicine. 2023. URL: <https://dspace.uzhnu.edu.ua/jspui/handle/lib/52847> (date of access: 17.10.2025).
9. Ahmed M., Sayed M., Saber A. F., Hassanien R., Kamal El-Dean A. M., Tolba M. S. Synthesis, characterization, and antimicrobial activity of new thienopyrimidine derivatives. *Polycyclic Aromatic Compounds*. 2022. Vol. 42, No. 6. P. 3079–3088. URL: <https://doi.org/10.1080/10406638.2020.1852587> (date of access: 17.10.2025).
10. Vlasova O., Vlasov S., Severina H., Borysov O., Yakovenko G., Khairulin A., Shynkarenko P., Rudenko R., Bozhanov V., Smielova N., Filimonova N., Georgiyants V. Bioisosteric replacement in the search for antimicrobial agents: design, synthesis and activity of novel 6-(1H-benzimidazol-2-yl)-1-alkyl-3,5-dimethylthieno[2,3-d]pyrimidine-2,4(1H,3H)-dione derivatives. *ScienceRise: Pharmaceutical Science*. 2025. № 4 (56). С. 43–55. URL: <https://doi.org/10.15587/2519-4852.2025.334881> (дата звернення: 17.10.2025).
11. Rashad A. E., Abdel-Megeid F. M., Abdel-Megid M., El Malah T., Shamroukh A. H. A Review of the Dimroth Rearrangement in Fused 1,2,4-Triazolo[4,3-c]pyrimidines. *Current Organic Chemistry*. 2025. URL: <https://doi.org/10.2174/0113852728385677250513065230> (date of access: 17.10.2025).
12. Manna T., Maji S., Maity M., Debnath B., Panda S., Khan S. A., Akhtar M. J. Anticancer potential and structure activity studies of purine and pyrimidine derivatives: an updated review. *Molecular Diversity*. 2025. Vol. 29, No. 1. P. 817–848. URL: <https://doi.org/10.1007/s11030-024-10870-4> (date of access: 17.10.2025).
13. García-Báez E. V., Padilla-Martínez I. I., Cruz A., Rosales-Hernández M. C. <sup>13</sup>C-NMR chemical shifts in 1,3-benzazoles as a tautomeric ratio criterion. *Molecules*. 2022. Vol. 27, No. 19. P. 6268. URL: <https://doi.org/10.3390/molecules27196268> (date of access: 17.10.2025).
14. Claridge T. D. High-resolution NMR techniques in organic chemistry. Vol. 27. Elsevier, 2016. URL: <https://www.sciencedirect.com/book/9780080999869/high-resolution-nmr-techniques-in-organic-chemistry> (date of access: 17.10.2025).
15. Reif B., Ashbrook S. E., Emsley L., Hong M. Solid-state NMR spectroscopy. *Nature Reviews Methods Primers*. 2021. Vol. 1. Article 2. URL: <https://doi.org/10.1038/s43586-020-00002-1> (date of access: 17.10.2025).

## REFERENCES:

1. Rizak, H. V. (2016). *Syntez, fizyko-khimichni ta biolohichni vlastyvoli 2,4-diokso- ta 4-imino-2-okso-3-fenil-5-R-6-R'-tieno[2,3-d]pirymidyniv: monohrafiia* [Synthesis, physicochemical and biological properties of 2,4-dioxo- and 4-imino-2-oxo-3-phenyl-5-R-6-R'-thieno[2,3-d]pyrimidines: Monograph]. Kyiv: Naukova Dumka. Retrieved from: <https://dspace.uzhnu.edu.ua/jspui/handle/lib/52778> [in Ukrainian].
2. Stryzhak, D. O. (2022). *YaMR-spektroskopiiia yak metod doslidzhennia budovy orhanichnykh spoluk* [NMR spectroscopy as a method for studying the structure of organic compounds]. *KhV Mendeleievski chytannia: Zbirnyk naukovykh prats Vseukrainskoi naukovo-praktychnoi konferentsii (Poltava, 2 ber. 2022 r.) – XV Mendeleev Readings: Collection of Scientific Works of the All-Ukrainian Scientific and Practical Conference (Poltava, March 2, 2022)*. Poltava: Redaktsiino-vydavnychiy viddil PNPu im. V. H. Korolenka, p. 55–56. Retrieved from: <http://dspace.pnpu.edu.ua/handle/123456789/18860> [in Ukrainian].
3. Nadar, S. S., Gawas, P. P., Kumbhar, N. M., & Salunke-Gawali, S. (2025). Thienopyrimidine: Unveiling the versatile potential of a promising heterocyclic scaffold in drug discovery. *Chemical Biology & Drug Design*, 105(6), e70146. <https://doi.org/10.1111/cbdd.70146>

4. Rizak, G. (2025). Use of NMR Spectroscopy for Studying 2,4-Dioxo- and 4-Imino-2-oxo-3-phenyl-5-R-6-R'-thieno[2,3-d]pyrimidines. *Futurity Proceedings*, 2. <https://doi.org/10.5281/zenodo.15207569>
5. Farag, M. A., Kandeel, M. M., Kassab, A. E., & Faggal, S. I. (2024). Medicinal attributes of thienopyrimidine scaffolds incorporating the aryl urea motif as potential anticancer candidates via VEGFR inhibition. *Archiv der Pharmazie*, 357(8), e2400125. <https://doi.org/10.1002/ardp.202400125>
6. Rizak, H. V. (2024). *Vyvchennia protsesiv atsylivannia 2,4-diokso- ta 4-imino-2-okso-3-fenil-5-R-6-R'-tieno[2,3-d]pirmidyniv* [Study of acylation processes of 2,4-dioxo- and 4-imino-2-oxo-3-phenyl-5-R-6-R'-thieno[2,3-d]pyrimidines]. *Ukrainskyi zhurnal pryrodnychych nauk – Ukrainian Journal of Natural Sciences*, 9, 133–139. <https://doi.org/10.32782/naturaljournal.9.2024.13>
7. Alsouk, A. A., Othman, I. M., Anwar, M. M., Saleh, A., & Nossier, E. S. (2025). Design, synthesis, and *in silico* studies of new quinazolinones tagged thiophene, thienopyrimidine, and thienopyridine scaffolds as antiproliferative agents with potential p38 $\alpha$  MAPK kinase inhibitory effects. *RSC Advances*, 15(2), 1407–1424. <https://doi.org/10.1039/D4RA06744D>
8. Rizak, H. V. (2023). Search for biologically active substances using the example of 2,4-dioxo- and 4-imino-2-oxo-3-phenyl-5-R-6-R'-thieno[2,3-d]pyrimidines, prospects for their use in pharmacy and medicine. <https://dspace.uzhnu.edu.ua/jspui/handle/lib/52847> (date of access: 17.10.2025).
9. Ahmed, M., Sayed, M., Saber, A. F., Hassanien, R., Kamal El-Dean, A. M., & Tolba, M. S. (2022). Synthesis, characterization, and antimicrobial activity of new thienopyrimidine derivatives. *Polycyclic Aromatic Compounds*, 42(6), 3079–3088. <https://doi.org/10.1080/10406638.2020.1852587>
10. Vlasova, O., Vlasov, S., Severina, H., Borysov, O., Yakovenko, G., Khairulin, A., Shynkarenko, P., Rudenko, R., Bozhanov, V., Smielova, N., Filimonova, N., & Georgiyants, V. (2025). Bioisosteric replacement in the search for antimicrobial agents: Design, synthesis and activity of novel 6-(1H-benzimidazol-2-yl)-1-alkyl-3,5-dimethylthieno[2,3-d]pyrimidine-2,4(1H,3H)-dione derivatives. *ScienceRise: Pharmaceutical Science*, 4(56), 43–55. <https://doi.org/10.15587/2519-4852.2025.334881> [in Ukrainian].
11. Rashad, A. E., Abdel-Megeid, F. M., Abdel-Megid, M., El Malah, T., & Shamroukh, A. H. (2025). A review of the Dimroth rearrangement in fused 1,2,4-triazolo[4,3-c]pyrimidines. *Current Organic Chemistry*. URL: <https://doi.org/10.2174/0113852728385677250513065230>
12. Manna, T., Maji, S., Maity, M., Debnath, B., Panda, S., Khan, S. A., & Akhtar, M. J. (2025). Anticancer potential and structure-activity studies of purine and pyrimidine derivatives: An updated review. *Molecular Diversity*, 29(1), 817–848. <https://doi.org/10.1007/s11030-024-10870-4>
13. García-Báez, E. V., Padilla-Martínez, I. I., Cruz, A., & Rosales-Hernández, M. C. (2022). <sup>13</sup>C-NMR chemical shifts in 1,3-benzazoles as a tautomeric ratio criterion. *Molecules*, 27(19), 6268. <https://doi.org/10.3390/molecules27196268>
14. Claridge, T. D. (2016). High-resolution NMR techniques in organic chemistry (Vol. 27). Elsevier. <https://www.sciencedirect.com/book/9780080999869/high-resolution-nmr-techniques-in-organic-chemistry>
15. Reif, B., Ashbrook, S. E., Emsley, L., & Hong, M. (2021). Solid-state NMR spectroscopy. *Nature Reviews Methods Primers*, 1, Article 2. <https://doi.org/10.1038/s43586-020-00002-1>

Стаття надійшла: 22.10.2025

Прийнято: 14.11.2025

Опубліковано: 30.12.2025

УДК 615.012:543.544

DOI <https://doi.org/10.32782/pcsd-2025-4-7>

**Тетяна САВЧУК**

кандидат хімічних наук, доцент, доцент кафедри неорганічної та фізичної хімії, Волинський національний університет імені Лесі Українки, просп. Волі, 13, м. Луцьк, Волинська обл., Україна, 43025  
**ORCID:** 0000-0001-9416-0643

**Світлана КОРОЛЬЧУК**

кандидат хімічних наук, доцент, доцент кафедри неорганічної та фізичної хімії, Волинський національний університет імені Лесі Українки, просп. Волі, 13, м. Луцьк, Волинська обл., Україна, 43025  
**ORCID:** 0000-0002-5830-3966

**Оксана ЮРЧЕНКО**

кандидат фізико-математичних наук, доцент, доцент кафедри неорганічної та фізичної хімії, Волинський національний університет імені Лесі Українки, просп. Волі, 13, м. Луцьк, Волинська обл., Україна, 43025  
**ORCID:** 0000-0002-6602-2929

**Назар ЦАЛКОВСЬКИЙ**

аспірант кафедри неорганічної та фізичної хімії, Волинський національний університет імені Лесі Українки, просп. Волі, 13, м. Луцьк, Волинська обл., Україна, 43025

**Ілля ЯКИМ'ЮК**

головний судовий експерт, Волинський науково-дослідний експертно-криміналістичний центр МВС України, вул. Винниченка, 43, м. Луцьк, Волинська обл., Україна, 43006  
**ORCID:** 0009-0009-0653-4330

**Олена КЛИМОВИЧ**

кандидат хімічних наук, завідувач сектору, Волинський науково-дослідний експертно-криміналістичний центр МВС України, вул. Винниченка, 43, м. Луцьк, Волинська обл., Україна, 43006  
**ORCID:** 0000-0002-7846-8047

**Бібліографічний опис статті:** Савчук, Т., Корольчук, С., Юрченко, О., Цалковський, Н., Яким'юк, І., Климович, О. (2025). Хроматографічне визначення парацетамолу та ібупрофену у фармацевтичних препаратах. *Проблеми хімії та сталого розвитку*, 4, 51–58, doi: <https://doi.org/10.32782/pcsd-2025-4-7>

## **ХРОМАТОГРАФІЧНЕ ВИЗНАЧЕННЯ ПАРАЦЕТАМОЛУ ТА ІБУПРОФЕНУ У ФАРМАЦЕВТИЧНИХ ПРЕПАРАТАХ**

Парацетамол та ібупрофен є найбільш поширеними безрецептурними лікарськими засобами, що застосовуються для усунення болювого синдрому, зниження температури тіла та зменшення запальних процесів. Висока частота їх використання, наявність великої кількості генеричних форм і самостійне застосування пацієнтами зумовлюють необхідність суворого контролю якості та достовірного визначення вмісту діючих речовин і домішок у лікарських формах. У статті проведено аналіз фізико-хімічних властивостей парацетамолу та ібупрофену, розглянуто їх фармакологічні характеристики, метаболізм і механізм дії. Окрему увагу приділено сучасним аналітичним підходам до ідентифікації та кількісного визначення цих препаратів у фармацевтичних і біологічних об'єктах. Розглянуто хроматографічні методи (ВЕРХ, HPLC-MS/MS, газова хроматографія), УФ-спектрофотометрію, титриметрію, електрохімічні методи аналізу. Проаналізовано їх чутливість, селек-

тивність, межі виявлення, швидкість виконання та придатність до рутинного контролю. Порівняння методів показало, що хроматографічні методи забезпечують найвищу точність і відтворюваність результатів, тоді як спектрофотометричні методи залишаються простими й доступними для експрес-аналізу. Результати дослідження підкреслюють важливість використання валідованих методів контролю якості для забезпечення безпечного та ефективного застосування парацетамолу й ібупрофену, що має значення для фармацевтичної та токсикологічної практики.

**Ключові слова:** парацетамол, ібупрофен, аналітичні методи, ВЕРХ (HPLC), УФ-спектрофотометрія, газова хроматографія, титриметрія, контроль якості, фармацевтичний аналіз, токсикологія.

**Tanya SAVCHUK**

*Candidate of Chemical Sciences, Associate Professor, Associate Professor at the Department of Inorganic and Physical Chemistry, Lesya Ukrainka Volyn National University, 13 Voli ave., Lutsk, Volyn region, Ukraine, 43025*

**ORCID:** 0000-0001-9416-0643

**Svitlana KOROLCHUK**

*Candidate of Chemical Sciences, Associate Professor, Associate Professor at the Department of Inorganic and Physical Chemistry, Lesya Ukrainka Volyn National University, 13 Voli ave., Lutsk, Volyn region, Ukraine, 43025*

**ORCID:** 0000-0002-5830-3966

**Oksana YURCHENKO**

*Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor, Associate Professor at the Department of Inorganic and Physical Chemistry, Lesya Ukrainka Volyn National University, 13 Voli ave., Lutsk, Volyn region, Ukraine, 43025*

**ORCID:** 0000-0002-6602-2929

**Nazar TSALKOVSKIY**

*Postgraduate Student at the Department of Inorganic and Physical Chemistry, Lesya Ukrainka Volyn National University, 13 Voli ave., Lutsk, Volyn region, Ukraine, 43025*

**Illia YAKYMIUK**

*Chief Forensic Expert, Volyn Scientific Research Forensic Center of the MIA of Ukraine, 43 Vynnychenka str., Lutsk, Volyn region, Ukraine, 43006*

**ORCID:** 0009-0009-0653-4330

**Olena KLYMOVYCH**

*Candidate of Chemical Sciences, Head of the Sector, Volyn Scientific Research Forensic Center of the MIA of Ukraine, 43 Vynnychenka str., Lutsk, Volyn region, Ukraine, 43006*

**ORCID:** 0000-0002-7846-8047

**To cite this article:** Savchuk, T., Korolchuk, S., Yurchenko, O., Tsalkovskyi, N., Yakymiuk, I., Klymovych, O. (2025). Khromatohrafichne vyznachennia parasetamolu ta ibuprofenu u farmatsevtichnykh preparatakh [Chromatographic determination of paracetamol and ibuprofen in pharmaceutical preparation]. *Problems of Chemistry and Sustainable Development*, 4, 51–58, doi: <https://doi.org/10.32782/pcsd-2025-4-7>

## CHROMATOGRAPHIC DETERMINATION OF PARACETAMOL AND IBUPROFEN IN PHARMACEUTICAL PREPARATION

*Paracetamol and ibuprofen are among the most widely used over-the-counter drugs for pain relief, fever reduction, and inflammation control. The high frequency of their use, the availability of numerous generic formulations, and the growing trend of self-medication highlight the importance of strict quality control and reliable determination of active ingredients and impurities in pharmaceutical preparations. This article presents an analysis of the physicochemical properties*

of paracetamol and ibuprofen, their pharmacological characteristics, metabolism, and mechanisms of action. Special attention is devoted to modern analytical approaches for their identification and quantification in pharmaceutical and biological samples. Chromatographic methods (HPLC, HPLC-MS/MS, gas chromatography), UV spectrophotometry, titrimetry, and electrochemical analysis techniques are reviewed. Their sensitivity, selectivity, detection limits, operational simplicity, and suitability for routine quality control are evaluated. The comparative analysis demonstrates that chromatographic methods provide the highest accuracy and reproducibility, while spectrophotometric techniques remain rapid and cost-effective for routine use. The findings emphasize the importance of validated analytical procedures to ensure the safety and efficacy of paracetamol and ibuprofen, contributing to pharmaceutical quality assurance and toxicological monitoring.

**Keywords:** paracetamol, ibuprofen, analytical methods, HPLC, UV spectrophotometry, gas chromatography, titrimetry, quality control, pharmaceutical analysis, toxicology.

**Актуальність проблеми.** Парацетамол та ібупрофен є найбільш уживаними безрецептурними лікарськими засобами у світі завдяки їхній доступності, ефективності та широкому спектру терапевтичної дії (Skoog D., 2017; Коваленко С. М., 2018). Ці препарати часто застосовуються для лікування болю, гарячки, запалення та інших симптомів як у дорослих, так і в дітей. Проте їх безпечне використання напряму залежить від точного дозування, дотримання стандартів якості та контролю за наявністю можливих домішок (Войка G., 2012; Zambakjian, C., 2020).

В умовах глобального зростання виробництва генеричних препаратів, збільшення частоти самостійного лікування, а також випадків фальсифікації лікарських засобів, особливого значення набуває забезпечення достовірного якісного та кількісного контролю парацетамолу та ібупрофену в різних лікарських формах (Moffat A.C., 2011; Рексан, G., 2025). Крім того, у разі передозування ці речовини можуть спричинити тяжкі токсичні ураження – зокрема гепатотоксичність (парацетамол) та гастро- або нефротоксичність (ібупрофен), що вимагає точного лабораторного моніторингу у біологічних середовищах (Nayan Pawar, 2023; Кузьмін В. І., 2020).

Сучасна аналітична хімія пропонує широкий спектр методів для визначення вмісту цих активних речовин, проте вибір оптимального методу залежить від матриці, цілей аналізу, необхідної чутливості та точності (British Pharmacopoeia, 2023; Snyder L. R., 2010). Тому розробка, оптимізація та валідація ефективних методик аналізу парацетамолу та ібупрофену є важливим науковим та практичним завданням фармації, хімії та медицини (Коваленко С. М., 2018; Войка G., 2012; Zambakjian, C., 2020; Moffat A. C., 2011).

**Мета дослідження.** Метою даного дослідження є аналіз фізико-хімічних властивостей

парацетамолу та ібупрофену, порівняння їхнього фармакологічного профілю, а також обґрунтування і оцінка сучасних аналітичних методів їх кількісного та якісного визначення у фармацевтичних препаратах і біологічних середовищах з метою забезпечення контролю якості, безпеки та ефективності застосування зазначених лікарських засобів. Окрема увага приділяється проведенню хроматографічного аналізу з метою визначення вмісту парацетамолу та ібупрофену в лікарських формах.

**Аналіз основних методів визначення.** Для визначення парацетамолу та ібупрофену в фармацевтичних препаратах, біологічних рідинах та інших матрицях використовується широкий спектр аналітичних методів. Вибір методу залежить від цілей аналізу (якісне чи кількісне визначення, наявність домішок), чутливості, точності, складності матриці, а також від наявного обладнання та економічної доцільності. Основні методи визначення цих препаратів можна згрупувати наступним чином (див. табл. 1) (Hoang, V. D., 2014; Suresh Reddy Yelampalli, 2023; Orapuh, C. J., 2025; B. S. Hoffman, 2022; United States Pharmacopoeia and National Formulary, 2020; British Pharmacopoeia, 2024; European Pharmacopoeia, 2023; Basavaiah K., 2007).

Проаналізовані аналітичні методи виявлення демонструють різний рівень чутливості, селективності та практичної придатності залежно від умов застосування. Зокрема: УФ-спектрофотометрія є простим і доступним методом для рутинного контролю, проте має обмеження через низьку селективність; ВЕРХ (HPLC) забезпечує високу точність і дозволяє одночасно визначати кілька компонентів у складних матрицях; HPLC-MS/MS та газова хроматографія демонструють виняткову чутливість і підходять для токсикологічного аналізу та фармакокінетичних досліджень; Титриметрія та ТІХХ залишаються актуальними для

Таблиця 1

**Порівняльна характеристика аналітичних методів визначення ібупрофену та парацетамолу**

Метод	Тип аналізу	Чутливість	Селективність	Сфера застосування	Переваги	Недоліки
УФ-спектрофотометрія	Кількісний	Середня ~1–5 мкг/мл	Низька	Таблетки, сиропи	Простота швидкість дешева	Можливі перешкоди від домішок
ВЕРХ (HPLC)	Кількісний/якісний	Висока ~0.1–1 мкг/мл	Висока	Таблетки, плазма, сеча	Висока точність, одночасне визначення кількох речовин	Вартісне обладнання, складність пробопідготовки
HPLC-MS/MS	Кількісний (трасовий рівень)	Дуже висока ~нано- або пікомольний рівень	Дуже висока	Фармакокінетика, токсикологія	Надзвичайна чутливість висока специфічність	Висока вартість, потребує високої кваліфікації
Газова хроматографія (ГХ)	Кількісний, токсикологічний	Висока	Висока	Токсикологія, біоізрази (після дериватизації)	Чутливість, точність	Необхідна хімічна обробка (дериватизація)
Титриметрія	Кількісний	Низька–середня	Низька	Простий аналіз фармформ	Простота, без обладнання	Низька специфічність
ТШХ (TLC)	Якісний/напівкількісний	Низька–середня	Середня	Скринінг, вхідний контроль	Дешева, доступна	Напівкількісний, суб'єктивність

швидкого скринінгу або контролю якості в умовах обмежених ресурсів.

**Експериментальна частина.** Чистоту препаратів ібупрофену та парацетамолу перевіряли методом газової хроматографії. Порівняльний аналіз умов проведення газохроматографічного дослідження показав, що для ібупрофену та парацетамолу використовували однакове обладнання (Shimadzu 2010Plus, колонка HP-5MS) та однаковий режим введення проби (автосамплер АОС-20i+s, split 20:1) із застосуванням полум'яно-іонізаційного детектора. Основні відмінності стосуються параметрів температурної програми та потоку газу-носія: для ібупрофену оптимальним виявився нижчий початковий температурний режим (85 °C) із поступовим нагріванням до 300 °C, тоді як для парацетамолу початкова температура була вищою (180 °C) із кінцевим нагрівом лише до 250 °C. Крім того, для ібупрофену швидкість потоку гелію становила 0,7 мл/хв, тоді як для парацетамолу – 1,0 мл/хв. Такі відмінності у параметрах підтверджують необхідність

індивідуального підбору умов хроматографування для кожної речовини з метою досягнення чіткої пікової роздільності та точності кількісного визначення (див табл. 2 та табл. 3)

**Результати та їх обговорення.** Визначення кількісного вмісту ібупрофену у таблетках різних виробників показало відмінності залежно від серії. У препараті ібупрофен Дарниця (200 мг) вміст діючої речовини становив у середньому близько 58–59 %, що є нижнім значенням серед досліджених зразків. Для препарату ібупрофен Лекхім (200 мг) кількісний вміст становив ~77 %, тоді як для ібупрофен АТ «Вітаміни» (200 мг) – найвищий рівень, близько 83 %. Препарат ібупрофен БХФВ (200 мг) продемонстрував значення на рівні ~64 %, а ібупрофен «Здоров'я» (200 мг) – близько 81 %. Таким чином, усі зразки містили діючу речовину в межах, близьких до заявленої дози (~200 мг), але спостерігаються коливання від 58 % до 83 %, що свідчить про відмінності у виробничих серіях та важливість контролю якості (див. табл. 4)

Таблиця 2

#### Умови проведення дослідження методом газової хроматографії (ібупрофен)

Газовий хроматограф	Shimadzu 2010Plus
Колонка	HP-5MS
довжина, діаметр, товщина покриття	30 м × 0,25 мм × 0,25 мкм
Газ-носії	Гелій
Потік газу-носія:	0,7 мл/хв (постійний потік)
Температурна програма термостата	$T_{\text{поч.}} = 85 \text{ }^\circ\text{C}$ (тримати 1 хв), нагрів $20 \text{ }^\circ\text{C/хв}$ до $T_{\text{кінц.}} = 300 \text{ }^\circ\text{C}$ (тримати 5 хв)
Режим вводу проби:	Автосамплер АОС-20i+s
Поділ потоку	Split 20:1
Детектор	полум'яно-іонізаційний детектор APC(Det3ch)
Температура детектора	310 °C
Температура інжектора	250 °C

Таблиця 3

#### Умови проведення дослідження методом газової хроматографії (парацетамол)

Газовий хроматограф	Shimadzu 2010Plus
Колонка	HP-5MS
довжина, діаметр, товщина покриття	30 м × 0,25 мм × 0,25 мкм
Газ-носії	Гелій
Потік газу-носія:	1,00 мл/хв (постійний потік)
Температурна програма термостата	$T_{\text{поч.}} = 180 \text{ }^\circ\text{C}$ (тримати 0,5 хв), нагрів $15 \text{ }^\circ\text{C/хв}$ до $T_{\text{кінц.}} = 250 \text{ }^\circ\text{C}$ (тримати 1 хв)
Режим вводу проби:	Автосамплер АОС-20i+s
Поділ потоку	Split 20:1
Детектор	полум'яно-іонізаційний детектор APC(Det3ch)
Температура детектора	300 °C
Температура інжектора	300 °C

Таблиця 4

## Результати визначення таблеток Ібупрофену

Торгова марка	Середня маса таблетки, г	Маса наважки досліджуваної речовини, г	Результати дослідження		
			Масова концентрація, мг/мл	Кількісний вміст $\omega$ , %	Маса ібупрофену, мг
Дарниця 200 мг	0,34046	0,01380	1,61752	58,61	199,54
		0,02591	3,04454	58,75	200,02
		0,01413	1,65202	58,44	198,96
Лекхім 200 мг	0,25837	0,01097	1,68513	76,81	198,45
		0,01405	2,16100	76,89	198,66
		0,01105	1,69545	76,73	198,25
АТ «Вітаміни» 200 мг	0,24356	0,01028	1,70869	83,12	203,23
		0,01029	1,71700	83,44	202,45
		0,01277	2,12695	83,31	202,91
БХФВ 200 мг	0,31578	0,01295	1,66014	64,12	201,48
		0,01440	1,84120	63,95	201,94
		0,02346	3,01877	64,33	203,14
«Здоров'я» 200 мг	0,24603	0,01491	2,41886	81,12	199,58
		0,01898	3,09087	81,44	200,37
		0,00985	1,60274	81,35	200,15

Таблиця 5

## Результати визначення парацетамолу

Торгова марка	Середня маса таблетки, г	Маса наважки досліджуваної речовини, г	Результати дослідження		
			Масова концентрація С, мг/мл	Кількісний вміст $\omega$ , %	Маса Ібупрофену т, мг
Здоров'я 325 мг	0,41381	0,00581	0,91209	78,44	324,59
		0,00462	0,72517	78,55	325,05
		0,00705	1,10727	78,49	324,80
Лубнифарм 325 мг	0,40650	0,00548	0,87693	79,99	325,16
		0,00659	1,05467	79,96	325,04
		0,00464	0,74116	79,81	324,43
Ахісиг 500 мг	0,64284	0,00581	0,90106	77,61	498,91
		0,00388	0,60180	77,64	499,10
		0,00454	0,70594	77,83	500,32
Лекхім 500 мг	0,58001	0,00434	0,74809	86,12	499,50
		0,00472	0,81260	86,03	498,98
		0,00497	0,85541	86,09	499,33
Дарниця 500 мг	0,64806	0,00736	1,13313	77,01	499,07
		0,00470	0,72603	77,23	500,50
		0,00511	0,78976	77,31	501,02

За результатами дослідження таблетованих форм парацетамолу різних виробників встановлено, що вміст діючої речовини у всіх зразках перебуває в межах допустимих норм. Для препаратів парацетамол Здоров'я (325 мг) та парацетамол Лубнифарм (325 мг) кількісний вміст становив близько 78–80 %, що відповідає заявленій дозі. Для препаратів парацетамол Ахісиг (500 мг) та парацетамол Дарниця (500 мг) вміст становив у межах 77–78 %, тоді як у препараті парацетамол Лекхім (500 мг) виявлено дещо

вищий відсоток – близько 86 %. Отримані результати свідчать про задовільну точність і відтворюваність методу та підтверджують відповідність досліджуваних лікарських засобів вимогам (див. табл. 5)

Для хроматографічного визначення парацетамолу та ібупрофену усіх торгових марок використовували об'єм розчинника – 5 мл, а об'єм досліджуваної проби – 1 мл.

**Висновки.** Парацетамол та ібупрофен, як одні з найпоширеніших безрецептурних

препаратів, відіграють важливу роль у сучасній медичній практиці завдяки своїм знеболювальним і жарознижувальним властивостям. Незважаючи на схожість у показаннях до застосування, ці речовини мають принципово різні механізми дії, що обумовлює різницю у терапевтичному застосуванні, ефективності та профілі побічних ефектів. Контроль якості, точне дозування та своєчасне виявлення навіть незначних концентрацій парацетамолу й ібупрофену в біологічних зразках або фармацевтичних

продуктах є критично важливими для безпеки пацієнтів.

Таким чином, вибір методу визначення повинен базуватися на меті дослідження, характері зразка, необхідному рівні чутливості та доступності лабораторного обладнання. Подальше вдосконалення аналітичних технологій сприятиме більш надійному моніторингу якості та безпеки вживаних лікарських засобів, включаючи контроль за можливими фальсифікаціями

#### ЛІТЕРАТУРА:

1. Skoog D. A., Holler F. J., Crouch S. R. Principles of Instrumental Analysis. Belmont: Brooks/Cole, 2017. 672 p.
2. Коваленко С. М., Філіпов С. М. Основи аналітичної хімії. Харків : НФаУ, 2018. 224 с.
3. Boyka G. Tsvetkova, Ivanka P. Pencheva, Alexander B. Zlatkov, Plamen T. Peikov Development and validation of RP-HPLC method for simultaneous determination of Paracetamol and Ibuprofen in fixed dose combinations. *International Journal of Pharmaceutical Sciences Review and Research*. 2012. 16 (1). 13–16.
4. Zambakjian C., Alhaj Sakur A. A new gas chromatographic method development and validation for the simultaneous determination of ibuprofen and caffeine in bulk and pharmaceutical dosage form. *Future Journal of Pharmaceutical Sciences*. 2020. 6(1). 239–246.
5. Moffat A. C., Osselton M. D., Widdop B. Clarke's analysis of drugs and poisons: in pharmaceuticals, body fluids and postmortem material. London: Pharmaceutical Press, 2011. 2112 p.
6. Pekcan G. Simultaneous Determination of Acetylsalicylic Acid, Paracetamol and Ascorbic Acid in Effervescent Tablet by Different Chemometric Methods. *J Pharm Res Sci Technol*. 2025. 9 (1). 186–195.
7. Nayan Pawar, Mangesh harole. Development and validation of UV spectrophotometric method for simultaneous estimation of caffeine and paracetamol in tablate formulation. *International Journal of Research in Pharmacy and Pharmaceutical*. 2023. 8(2). 113–118.
8. Кузьмін В. І., Лук'янець О. О., Іванченко Г. І. Аналітична хімія: навчальний посібник. Київ : КНУ, 2020. 312 с.
9. British Pharmacopoeia. London : The Stationery Office, 2023. 5128 p.
10. Snyder L. R., Kirkland J. J., Dolan J. W. Introduction to Modern Liquid Chromatography. Hoboken : Wiley, 2010. 912 p.
11. Moffat A. C., Osselton M. D., Widdop B. Clarke's Analysis of Drugs and Poisons. London : Pharmaceutical Press, 2011. 2112 p.
12. Hoang, V. D., Ly, D. T. H., Tho, N. H., Nguyen, H. M. T. UV spectrophotometric simultaneous determination of paracetamol and ibuprofen in combined tablets by derivative and wavelet transforms. *The Scientific World Journal*. 2014. 1. 313–324.
13. Suresh Reddy Yelampalli, Mercy Anvitha Kamireddy, Deepti Kolli. Stability Indicating Analytical Method for Simultaneous Estimation of Assay of Ibuprofen, Domiphen Bromide and Related Substances of Ibuprofen in Finished Formulation by UPLC. *Europen Chemical Bulletin*. 2023. 12(4). 851–871.
14. Orapuh, C. J., et al. Development and validation of a UV/visible spectrophotometric method for simultaneous assay of paracetamol and ibuprofen. *Orapuh Journal*. 2025. 6(1). 113–118.
15. B. S. Hoffman, M. J. Burns, R. S. Howland, M. A. Lewin, N. E. Nelson. Goldfrank's Toxicologic Emergencies. New York : McGraw-Hill Education, 2022. 1984 p.
16. United States Pharmacopeia and National Formulary (USP 43–NF 38). Rockville, MD : United States Pharmacopeial Convention, 2020.
17. British Pharmacopoeia 2024. London : Medicines and Healthcare products Regulatory Agency (MHRA), 2024. European Pharmacopoeia. 11th ed. Strasbourg : Council of Europe, 2023.
18. Basavaiah K., Somashekar B. C. Titrimetric and Spectrophotometric Determination of Metoprolol tartrate in Pharmaceuticals Using N-Bromosuccinimide. *E-Journal of Chemistry*, 2007. Vol. 33(1). 117–127.

**REFERENCES:**

1. Skoog, D. A., Holler, F. J., & Crouch, S. R. (2017). Principles of Instrumental Analysis. Belmont: Brooks/Cole.
2. Kovalenk, o S. M., & Filipov, S. M. (2018). *Osnovy analitychnoi khimii*. [Basics of Analytical Chemistry]. Kharkiv. [in Ukrainian].
3. Boyka G. Tsvetkova, Ivanka P. Pencheva, Alexander B. Zlatkov, Plamen T. (2012). Peikov Development and validation of RP-HPLC method for simultaneous determination of Paracetamol and Ibuprofen in fixed dose combinations. *International Journal of Pharmaceutical Sciences Review and Research*.
4. Zambakjian, C., & Alhaj Sakur, A. (2020). A new gas chromatographic method development and validation for the simultaneous determination of ibuprofen and caffeine in bulk and pharmaceutical dosage form. *Future Journal of Pharmaceutical Sciences*. 6(1). 239–246.
5. Moffat, A. C., Osselton, M. D., & Widdop, B. (2011). Clarke's analysis of drugs and poisons: in pharmaceuticals, body fluids and postmortem material. London : Pharmaceutical Press.
6. Pekcan, G. (2025). Simultaneous Determination of Acetylsalicylic Acid, Paracetamol and Ascorbic Acid in Effervescent Tablet by Different Chemometric Methods. *J Pharm Res Sci Technol*, 9 (1), 186–195.
7. Nayan Pawar, Mangesh harole. (2023). Development and validation of UV spectrophotometric method for simultaneous estimation of caffeine and paracetamol in tablate formulation. *International Journal of Research in Pharmacy and Pharmaceutical*, 8(2), 113–118.
8. Kuzmin, V. I., Lukianets, O. O., & Ivanchenko, H. I. (2020). *Analitichna khimiia: navchalnyi posibnyk* [Analytical Chemistry: A Study Guide]. Kyiv. [in Ukrainian].
9. British Pharmacopoeia. (2023). London : The Stationery Office.
10. Snyder, L. R., Kirkland, J. J., & Dolan, J. W. (2010). Introduction to Modern Liquid Chromatography. Hoboken : Wiley.
11. Moffat, A. C., Osselton, M. D., Widdop, B. Clarke's (2011). Analysis of Drugs and Poisons. London : Pharmaceutical Press.
12. Hoang, V. D., Ly, D. T. H., Tho, N. H., & Nguyen, H. M. T. (2014). UV spectrophotometric simultaneous determination of paracetamol and ibuprofen in combined tablets by derivative and wavelet transforms. *The Scientific World Journal*. 1. 313–324.
13. Suresh Reddy Yelampalli, Mercy Anvitha Kamireddy, Deepti Kolli. (2023). Stability Indicating Analytical Method for Simultaneous Estimation of Assay of Ibuprofen, Domiphen Bromide and Related Substances of Ibuprofen in Finished Formulation by UPLC. *European Chemical Bulletin*, 12(4), 851–871.
14. Orapuh, C. J., et al. (2025). Development and validation of a UV/visible spectrophotometric method for simultaneous assay of paracetamol and ibuprofen. *Orapuh Journal*, 6(1), 113–118.
15. Hoffman, B. S., Burns, M. J., Howland, R. S., Lewin, M. A., & Nelson, N. E. (2022). Goldfrank's Toxicologic Emergencies. New York : McGraw-Hill Education.
16. United States Pharmacopeia and National Formulary (USP 43–NF 38). (2020). Rockville, MD : United States Pharmacopeial Convention.
17. British Pharmacopoeia 2024. (2024). London : Medicines and Healthcare products Regulatory Agency (MHRA).
18. European Pharmacopoeia (2023). 11th ed. Strasbourg : Council of Europe.
19. Basavaiah, K., & Somashekar, B. C. (2007). Titrimetric and Spectrophotometric Determination of Metoprolol tartrate in Pharmaceuticals Using N-Bromosuccinimide. *E-Journal of Chemistry*, 33(1), 117–127.

Стаття надійшла: 11.11.2025

Прийнято: 03.12.2025

Опубліковано: 30.12.2025

УДК 543.422.8

DOI <https://doi.org/10.32782/pcsd-2025-4-8>**Ганна ТКАЧУК**

кандидат технічних наук, доцент кафедри хімії та хімічної інженерії, Хмельницький національний університет, вул. Інститутська, 11, м. Хмельницький, Україна, 29016

**ORCID:** 0000-0003-3502-0557**Scopus Author ID:** 57208406668**Андрій ТКАЧУК**

викладач кафедри фізики, математики та інформатики, Хмельницький національний університет, вул. Інститутська, 11, м. Хмельницький, Україна, 29016

**ORCID:** 0000-0003-0865-9603**Scopus Author ID:** 59921056100**Олександр СТРЕМЕЦЬКИЙ**

старший викладач кафедри хімії та хімічної інженерії, Хмельницький національний університет, вул. Інститутська, 11, м. Хмельницький, Хмельницька обл., Україна, 29016; судовий експерт, Хмельницький науково-дослідний експертно-криміналістичний центр МВС України, вул. Молодіжна, 12, м. Хмельницький, Україна, 29018

**ORCID:** 0000-0001-6137-4557**Олег МАРЧУК**

доктор хімічних наук, професор, професор кафедри неорганічної та фізичної хімії, Волинський національний університет імені Лесі Українки, просп. Волі, 13, м. Луцьк, Волинська обл., Україна, 43025

**ORCID:** 0000-0002-5618-7156**Scopus Author ID:** 57191781842

**Бібліографічний опис статті:** Ткачук, Г., Ткачук, А., Стремецький, О., Марчук, О. (2025). Рентгенофлуоресцентне дослідження сплавів, що містять золото та срібло. *Проблеми хімії та сталого розвитку*, 4, 59–68, doi: <https://doi.org/10.32782/pcsd-2025-4-8>

## РЕНТГЕНОФЛУОРЕСЦЕНТНЕ ДОСЛІДЖЕННЯ СПЛАВІВ, ЩО МІСТЯТЬ ЗОЛОТО ТА СРІБЛО

У роботі представлені результати дослідження хімічного складу сплавів, що містять золото та срібло, а також інші метали, із застосуванням сучасного неруйнівного методу рентгенофлуоресцентного аналізу (РФА). Актуальність дослідження зумовлена необхідністю контролю якості дорогоцінних металів на ринку ювелірних виробів, де часто зустрічаються відхилення від заявлених стандартів. Метою роботи було виявлення та аналіз фактичного складу ювелірних виробів, медалей та монет різного історичного періоду та походження.

Для дослідження було використано спектрометр ElvaX з програмним забезпеченням, за допомогою якого проведено кількісний та якісний аналіз сплавів. У ході дослідження ювелірних виробів із золота встановлено, що проба більшості проаналізованих зразків не відповідає клеймуванню. Зокрема, у сучасних виробках 585 проби вміст золота коливався в межах 58.14–58.55 %, що для деяких виробів є нижчим за мінімально допустимий стандарт. Виявлено, що для здешевлення сплавів срібло в лігатурі часто замінюють цинком, який є значно дешевшим. Також в одному зі зразків виявлені небажані домішки нікелю, який є потенційним алергеном. Аналіз срібних виробів також продемонстрував значні відхилення: вміст срібла у деяких зразках був нижчим за заявлену 925 пробу, тоді як в інших значно перевищував її.

Дослідження золотих та срібних медалей та монет підтвердило історичні особливості їх виробництва. Наприклад, золота монета часів Миколи II майже ідеально відповідає заявленій 900 пробі, а срібні полтинники викарбувані в 20-х р.р. минулого століття мають завищений вміст срібла. Аналіз сучасних монет Євросоюзу,

України та Польщі підтвердив використання спеціалізованих сплавів, таких як нейзильбер та Nordic Gold, що відповідає відомим технологіям карбування. Отримані результати підтверджують, що метод РФА є надійним інструментом для швидкого та ефективного контролю складу металевих виробів, дозволяючи виявляти невідповідності та фальсифікації, що особливо важливо як для експертних установ, так і для споживачів. Загалом, проведений аналіз демонструє високу ефективність РФА для експертного дослідження.

**Ключові слова:** рентгенофлуоресцентний аналіз, сплави золота, сплави срібла, металічні сплави, ювелірні вироби, монети.

### **Hanna TKACHUK**

*Candidate of Technical Sciences, Associate Professor at the Department of Chemistry and Chemical Engineering, Khmelnytskyi National University, 11 Instytutaska str., Khmelnytskyi, Ukraine, 29016*

**ORCID:** 0000-0003-3502-0557

**Scopus Author ID:** 57208406668

### **Andrii TKACHUK**

*Lecturer at the Department of Physics, Mathematics and Informatics, Khmelnytskyi National University, 11 Instytutaska str., Khmelnytskyi, Ukraine, 29016*

**ORCID:** 0000-0003-0865-9603

**Scopus Author ID:** 59921056100

### **Oleksandr STREMETS'KYI**

*Senior Lecturer at the Department of Chemistry and Chemical Engineering, Khmelnytskyi National University, 11 Instytutaska str., Khmelnytskyi, Ukraine, 29016; Forensic Expert, Khmelnytskyi Scientific Research Forensic Center of the Ministry of Internal Affairs of Ukraine, 12 Molodizhna str., Khmelnytskyi, Ukraine, 29018*

**ORCID:** 0000-0001-6137-4557

### **Oleh MARCHUK**

*Doctor of Chemical Sciences, Professor, Professor at the Department of Inorganic and Physical Chemistry, Lesya Ukrainka Volyn National University, 13 Voli ave., Lutsk, Volyn Region, Ukraine, 43025*

**ORCID:** 0000-0002-5618-7156

**Scopus Author ID:** 57191781842

**To cite this article:** Tkachuk, H., Tkachuk, A., Stremetskyi, O., Marchuk, O. (2025). Renthenofluorescentne doslidzhennia splaviv, shcho mistiat zoloto ta sriblo [X-ray fluorescence study of alloys containing gold and silver]. *Problems of Chemistry and Sustainable Development*, 4, 59–68, doi: <https://doi.org/10.32782/pcsd-2025-4-8>

## **X-RAY FLUORESCENCE STUDY OF ALLOYS CONTAINING GOLD AND SILVER**

*This paper presents the results of a comprehensive study of the chemical composition of alloys containing gold and silver, as well as other metals, using the modern non-destructive X-ray fluorescence (XRF) analysis method. The relevance of the research is determined by the need for quality control of precious metals in the jewellery market, where deviations from declared standards are often encountered. The aim of the work was to identify and analyze the actual composition of jewellery, medals, and coins from various historical periods and origins.*

*For the study, an ElvaX spectrometer was used to perform quantitative and qualitative analysis of the alloys. During the analysis of gold jewellery, it was found that the fineness of most of the analyzed samples did not correspond to the hallmark. Specifically, in modern 585-fineness items, the gold content ranged from 58.14–58.55 %, which for some items is below the minimum permissible standard. It was discovered that to cheapen the alloys, silver in the ligature is often replaced with zinc, which is significantly cheaper. Additionally, an undesirable impurity of nickel, a potential allergen, was found in one of the samples. The analysis of silver items also showed significant deviations: the silver content in some samples was lower than the declared 925 fineness, while in others it significantly exceeded it.*

*The study of gold and silver medals and coins confirmed the historical features of their production. For example, a gold coin from the time of Nicholas II (sample 12) almost perfectly matches the declared 900 fineness, while silver «poltinniks» (samples 14, 15) have an inflated silver content. The analysis of modern coins from the European Union, Ukraine, and Poland confirmed the use of specialized alloys such as Neusilber and Nordic Gold, which is consistent with*

known minting technologies. The results confirm that the XRF method is a reliable tool for quick and effective control of the composition of metal products, allowing for the detection of inconsistencies and falsifications, which is particularly important for both expert institutions and consumers. Overall, the conducted analysis demonstrates the high effectiveness of XRF for expert examination.

**Keywords:** X-ray fluorescence analysis, gold alloys, silver alloys, jewellery, coins.

Gold and silver items, traditionally used as jewellery, remain popular due to their aesthetic qualities and corrosion resistance. However, pure gold is a soft metal, meaning jewellery made from it quickly deforms. To enhance wear resistance, reduce cost, and expand the colour palette, other metals are added to gold, forming alloys.

The mass content of the precious metal in an alloy is called the fineness and is marked with a digital hallmark. In Ukraine, as in many other countries, the metric fineness system is used, which indicates the number of grams of pure metal per one kilogram of the alloy (Instruction, 1999).

The colour of a gold alloy depends on the composition of the ligature (alloying elements). For example, yellow gold is achieved with a balanced content of zinc, copper, and silver. The intensity of red gold is determined by the proportion of copper, while white gold requires the addition of platinum, palladium, silver, or, in some cases, nickel. Notably, the use of nickel in jewellery manufacturing in Europe has been banned since 2011 due to its allergenic properties (Tkachuk, 2023).

Unfortunately, counterfeits are often found in the jewellery market, which makes controlling the composition of these items essential. One of the most effective methods for this purpose is X-ray Fluorescence Analysis (XRF), which allows for the rapid and non-destructive determination of the qualitative and quantitative composition of the material. XRF is actively used in forensic science and the jewellery industry, particularly for checking fineness conformity (Tkachuk & Navrotska, 2022).

The aim of this work is to investigate the chemical composition of gold and silver alloys, as well as other metal items, using the XRF method, and to compare the obtained results with the declared characteristics of the items.

The study employed the ElvaX X-ray fluorescence spectrometer (Beckhoff, 2007). The analysis was conducted on the following sample groups:

- gold jewellery: three modern, yellow gold items with 585 fineness of Ukrainian manufacture (Samples 1, 2, 3); red gold earrings with 585 fineness, dating from the 1990s (Sample 4);

Table 1

### Qualitative and quantitative composition of gold jewelry

Sample Number	Element	Acquisition Time, s	Line Series	Intensity	Content, %
1	Au	121	L	–	58.191 ± 0.146
	Cu		K	–	30.722 ± 0.121
	Zn		K	–	8.845 ± 0.113
	Ag		K	–	2.242 ± 0.033
2	Au	120	L	–	58.144 ± 0.131
	Cu		K	–	30.503 ± 0.112
	Zn		K	–	7.497 ± 0.100
	Ag		K	–	3.274 ± 0.034
	Ni		K	–	0.583 ± 0,031
3	Au	121	L	–	58.546 ± 0.128
	Cu		K	–	26.849 ± 0.108
	Ag		K	–	7.807 ± 0.049
	Zn		K	–	6.797 ± 0.095
4	Au	121	L	936,912	39.800 ± 0.079
	Ag		K	320,000	39.133 ± 0.093
	Cu		K	616,841	21.067 ± 0.056
5	Au	141	L	550,127	74.546 ± 0.092
	Ag		K	182,283	15.511 ± 0.070
	Cu		K	78,821	9.943 ± 0.074

yellow gold ring with 750 fineness, produced in the USSR during the 1960s (Sample 5);

– silver jewellery: a ring with 925 fineness from Greece (Sample 6); a bracelet from Sri Lanka (Sample 7); a necklace from Ukraine, 19th–20th centuries (Sample 8); a brooch with 925 fineness, dating from the beginning of the second half of the 20th century (Sample 9);

– gold and silver coins and medals: gold medals from 1958 and 1987 (Samples 10, 11); a gold coin from the time of Nicholas II (late 19th – early 20th century) (Sample 12); a silver commemorative coin, «Princess Olga,» 1999 (Sample 13); silver «poltinnik» coins from the USSR, 1924 and 1925 (Samples 14, 15);

– items made from other alloys: an ornament made of a copper and silver alloy (Sample 16); a

brass ornament (Sample 17); USSR 1 ruble coins (Samples 18, 19); European Union coins with denominations of 2€, 1€, 50¢, 1¢ (Samples 20, 21, 22, 23); a Polish coin with 1 grosz denomination (Sample 24); a Ukrainian coin with 2 UAH denomination (Sample 25).

Spectra and quantitative characteristics were obtained using the ElvaX software, which also determined the fineness of the items. The analysis time for each sample is specified in the corresponding tables.

The results of the gold jewellery analysis are presented in Table 1 and Figure 1. The analysis duration, typically 120–141 seconds, was chosen to ensure high statistical reliability with an error margin of  $\pm 0.079$ – $0.146$  %. The analysis utilized the L-series lines (around 9.7 keV) for gold, and

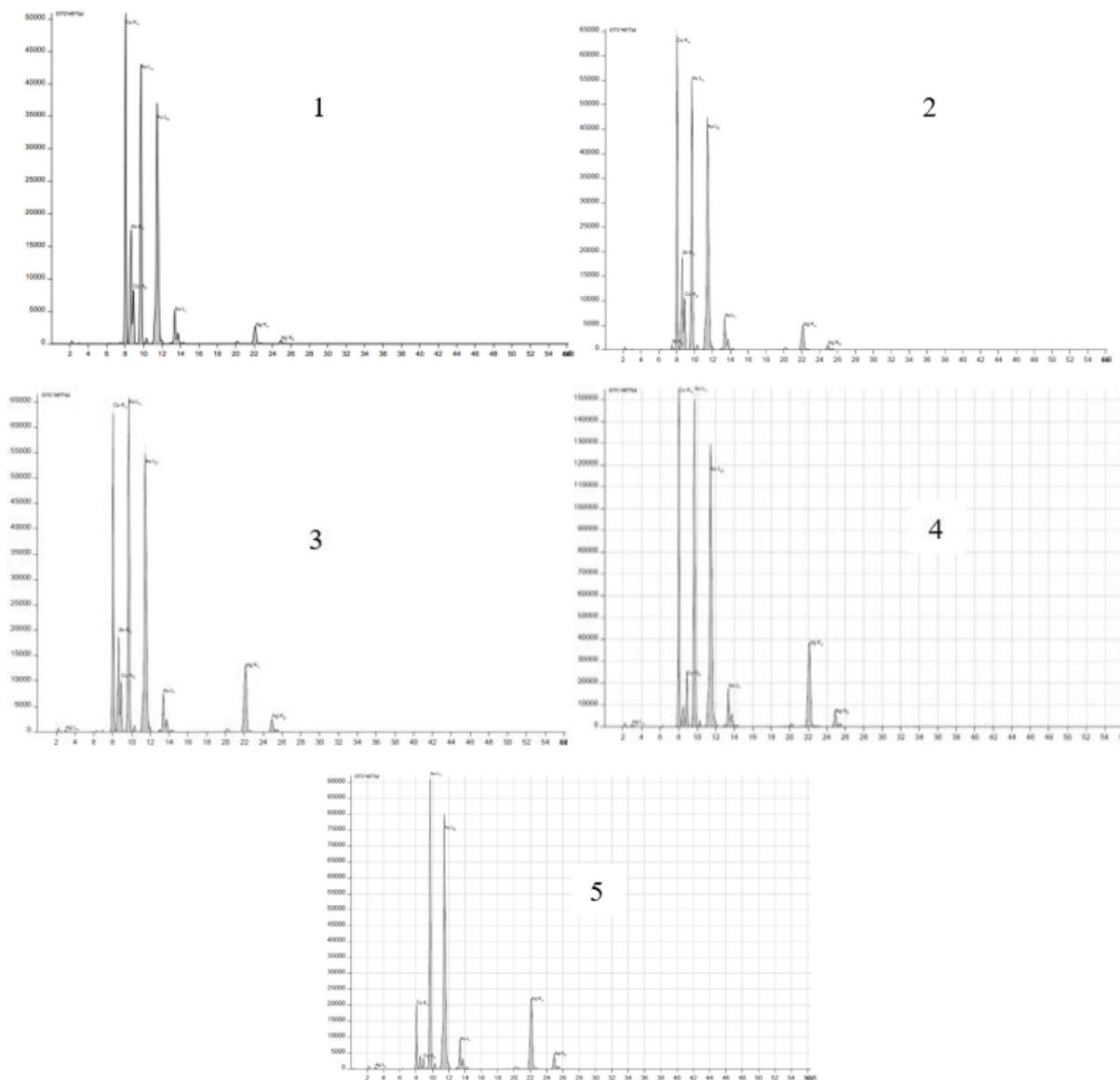
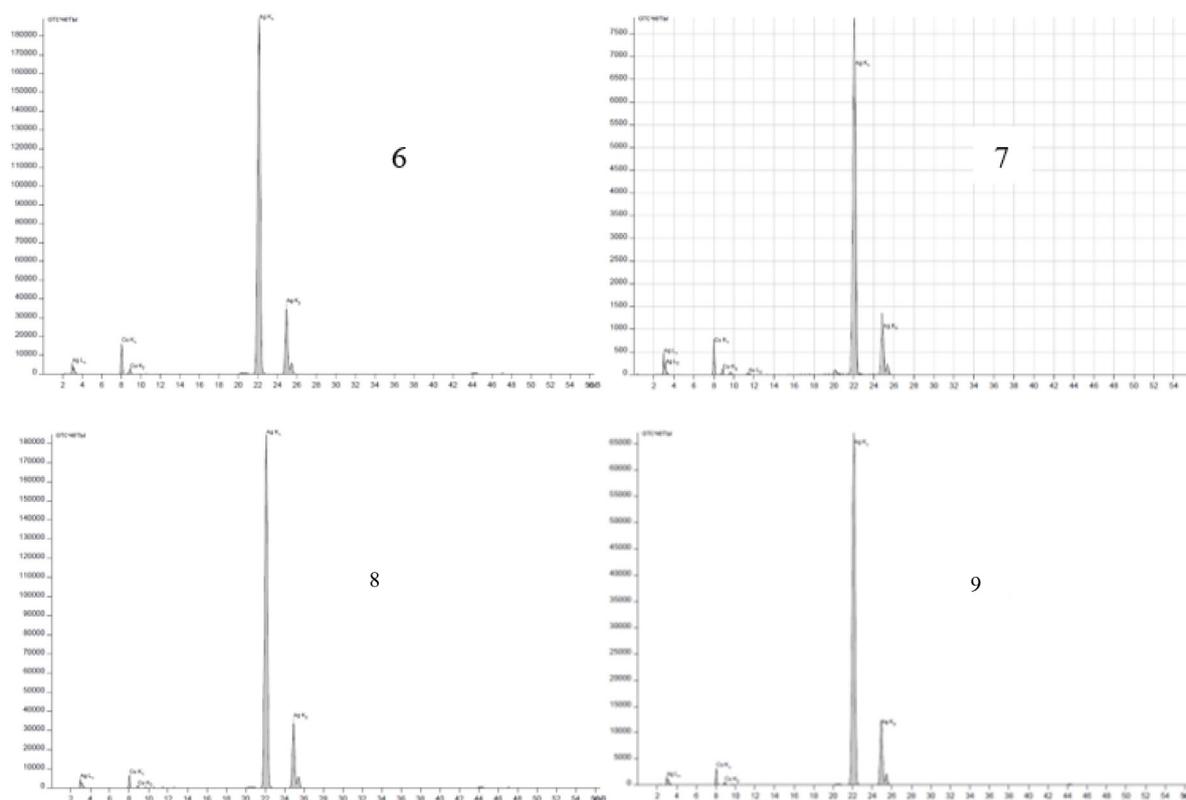


Fig. 1. XRF spectrum of gold jewelry

Table 2

**Qualitative and quantitative composition of silver jewelry**

Sample Number	Element	Acquisition Time, s	Line Series	Intensity	Content, %
6	Ag	31	K	1,579,772	92.246 ± 0.066
	Cu		K	62,168	7.754 ± 0.075
7	Ag	41	K	57,131	97.970 ± 0.294
	Cu		K	2,734	1.886 ± 0.082
	Au		L	266	0.144 ± 0.028
8	Ag	31	K	1,541,077	96.535 ± 0.053
	Cu		K	25,822	3.465 ± 0.057
9	Ag	31	K	554,818	95.278 ± 0.082
	Cu		K	12,427	4.722 ± 0.094



**Fig. 2. XRF spectrum of silver jewelry**

Table 3

**Qualitative and quantitative composition of gold medals and gold and silver coins**

Sample Number	Element	Acquisition Time, s	Line Series	Intensity	Content, %
10	Au	120	L	7,635,779	79.952 ± 0.038
	Cu		K	2,188,384	18.413 ± 0.028
	Ag		K	272,384	1.635 ± 0.008
11	Au	121	L	10,187,186	98.876 ± 0.02
	Cu		K	127,699	1.124 ± 0.011
12	Au	121	L	9,275,587	91.647 ± 0.020
	Cu		K	961,591	8.122 ± 0.019
	Ag		K	36,048	0.231 ± 0.005
13	Ag	30	K	1,373,192	91.59 ± 0.12
	Cu		K	26,862	8.41 ± 0.18
14	Ag	31	K	1,604,525	97.397 ± 0.048
	Cu		K	20,005	2.603 ± 0.049
15	Ag	31	K	1,432,794	95.95 ± 0.10
	Cu		K	12,869	4.05 ± 0.14

the K-series lines for the lighter alloying elements: copper, zinc, and silver.

The ElvaX spectrometer software determined the fineness of samples 1 and 2 to be only 500, while Sample 3 was identified as 585. This indicates that the gold content in the first two items (58.19 % and 58.14 %, respectively) was lower than the minimum permissible standard for 585 fineness (58.33 %). This discrepancy may result from rounding errors or a violation of manufacturing technology (Artyukh, 2018). The gold content in sample 3 (58.55 %) did, however, match the declared fineness.

Analysis of the alloying elements in the modern yellow gold items (samples 1–3) revealed

that after gold, copper was the most prevalent element (21–31 %). Crucially, zinc (7–8.5 %), which is significantly cheaper than silver, constituted a larger proportion of the alloy than silver (2.2–8 %). This confirms that jewellers may be replacing silver with zinc to reduce the manufacturing cost of the items. Additionally, a minor content of nickel (~0.5 %) was detected in sample 2, which is an undesirable impurity (Lemberge, n.d.).

Sample 4 contains Au 39.80 %, Ag 39.13 and Cu 21.07 % which does not correspond to any standard fineness. However, neither zinc nor nickel was detected in this item. Sample 5, manufactured in the USSR and marked as 750 fineness, showed

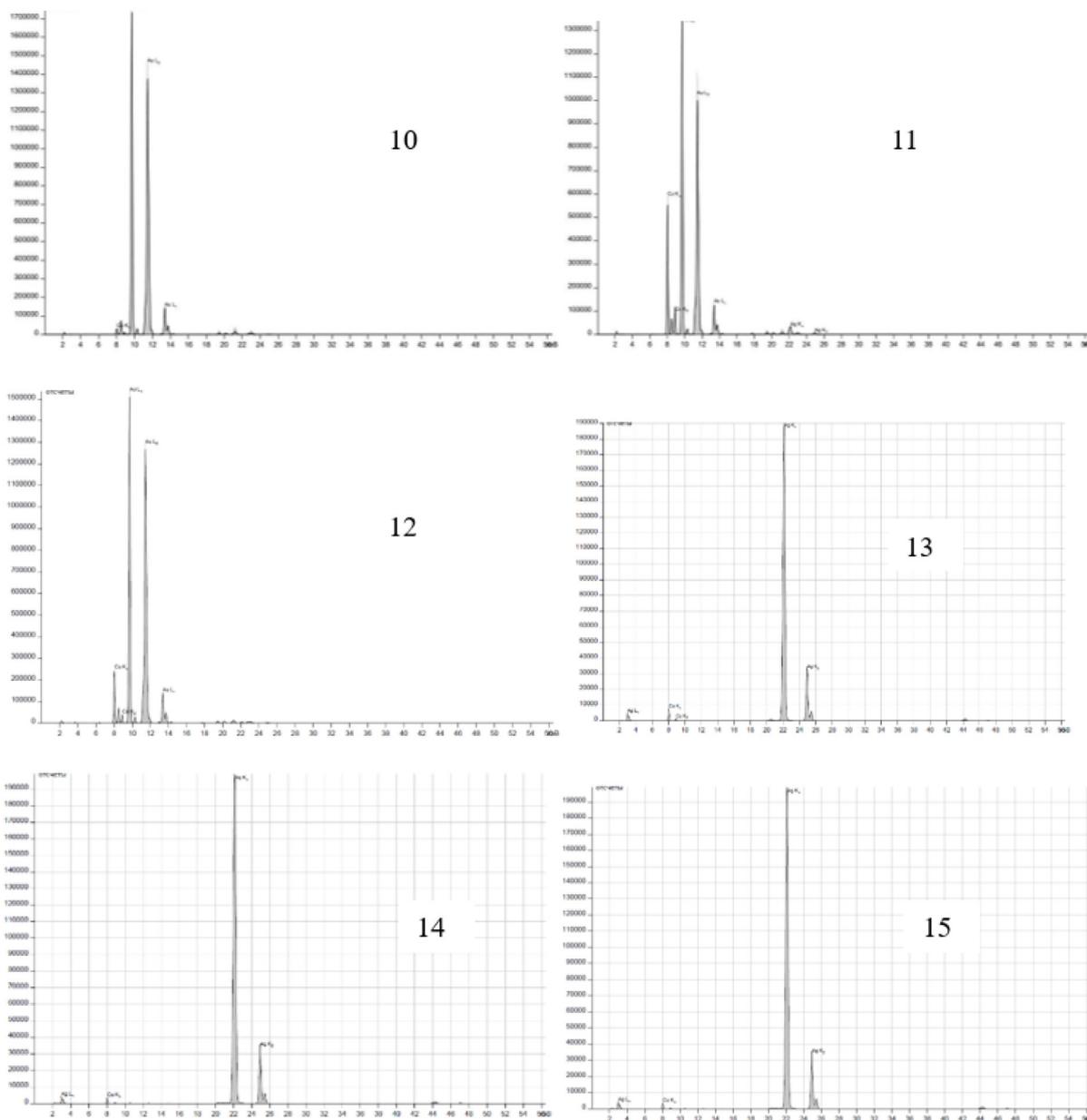


Fig. 3. XRF spectra of gold medals and gold and silver coins

a content of according to the XRF results, placing it Au 74.55 % closer to 585 fineness than to 750. The ratio of alloying elements in this sample is also distinct, with a higher silver content (15.51 %) than copper content (9.94 %) (Li, 2015).

The results from the analysis of silver jewellery are presented in Table 2 and Figure 2. The analysis time, ranging from 31 to 41 seconds, was considered sufficient to achieve an acceptable error margin of  $\pm 0.053$ – $0.294$  %. The K-series lines with an energy of approximately 22 keV were used for this analysis.

According to the XRF results, the silver content in Sample 6 was 92.25 %, which is slightly below the standard for 925 fineness. Consequently, the software identified it as 875 fineness. Sample 7 contained silver 97.97 % and copper 1.89 % with a minor gold impurity, a composition that does not correspond to any standard fineness. The necklace (Sample 8) showed a composition of Ag 96.54 % and Cu 3.47 %, corresponding to 960 fineness. The brooch (Sample 9), though marked as 925 fineness,

showed an analysis result of Ag 95.28 % and Cu 4.72 %, significantly exceeding the 925-fineness standard. These results clearly demonstrate the considerable variations in the composition of silver items (Chiojdeanu & Cristea-Stan, 2011).

The results from the analysis of the gold medals and gold and silver coins are presented in Table 3 and Figure 3.

The gold medal from 1958 (Sample 10) contained gold (~80 %), suggesting the use of an alloy different from what may have been declared. The gold medal from 1987 (Sample 11) had a composition 98.88 % of gold. Since a surface analysis method was applied, this very high gold content is likely explained by the presence of gold plating on the item. The gold coin from the time of Nicholas II (Sample 12) confirmed the declared 900 fineness with a composition of Au 91.65 %, Cu 8.12 %, Ag 0.23 %.

The silver commemorative coin “Princess Olga” from 1999 (Sample 13), declared as 925 fineness, showed an Ag content of 91.59 %, which is closer

Table 4

#### Qualitative and quantitative composition of non-jewelry art products and coins

Sample Number	Element	Acquisition Time, s	Line Series	Intensity	Content, %
16	Cu	30	K	609,602	74.73 $\pm$ 0.16
	Ag		K	824,458	25.27 $\pm$ 0.07
17	Cu	31	K	962,090	65.26 $\pm$ 0.10
	Zn		K	737,133	34.74 $\pm$ 0.09
18	Cu	31	K	925,133	56.94 $\pm$ 0.11
	Zn		K	459,765	29.10 $\pm$ 0.10
	Ni		K	210,702	10.99 $\pm$ 0.06
	Mn		K	31,611	2.97 $\pm$ 0.06
19	Cu	31	K	879,341	54.19 $\pm$ 0.11
	Zn		K	507,179	54.19 $\pm$ 0.11
	Ni		K	202,337	10.44 $\pm$ 0.06
	Mn		K	43,546	10.44 $\pm$ 0.06
20	Cu	121	K	5,039,532	76.681 $\pm$ 0.035
	Zn		K	1,444,329	18.441 $\pm$ 0.037
	Ni		K	381,559	4.877 $\pm$ 0.018
21	Cu	120	K	6,139,683	77.432 $\pm$ 0.036
	Ni		K	1,645,825	22.568 $\pm$ 0.032
22	Cu	21	K	2,967,861	94.843 $\pm$ 0.069
	Zn		K	223,458	5.157 $\pm$ 0.046
23	Cu	21	K	3,016,710	96.510 $\pm$ 0.068
	Fe		K	136,896	3.490 $\pm$ 0.037
24	Cu	120	K	5,237,297	77.754 $\pm$ 0.031
	Zn		K	1,940,193	20.957 $\pm$ 0.036
	Fe		K	105,628	1.289 $\pm$ 0.015
25	Ni	21	K	3,051,365	99.508 $\pm$ 0.0
	Fe		K	22,173	0.492 $\pm$ 0.016

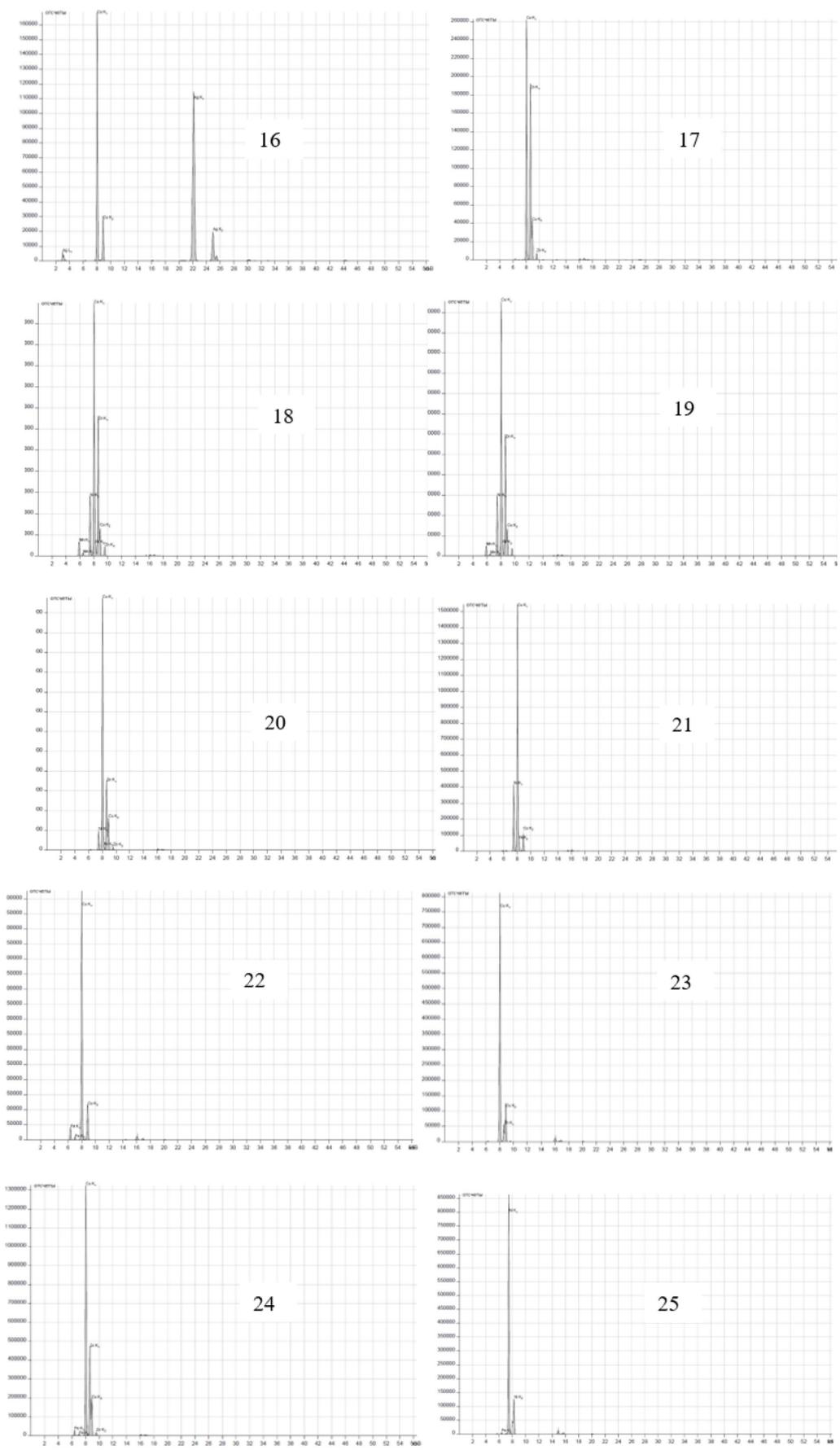


Fig. 4. XRF spectra of non-jewelry art products and coins

to the 875-fineness determined by the instrument (Serrano, 2023). The silver “poltinnik” coins from 1924 (sample 14) and 1925 (Sample 15), despite being marked as 900 fineness, demonstrated an elevated silver content (97.40 % and 95.95 %, respectively).

In addition to the gold and silver items, we investigated ornaments that do not belong to the jewellery category but can be classified as art metal products or costume jewellery, as well as various coins. The results of these studies are shown in Table 4 and Figure 4.

Sample 16, containing 74.73 % Cu and 25.27 % Ag, is a copper-silver alloy that does not adhere to traditional jewellery standards. It is most likely classified as costume jewellery. The composition of the brass ornament (Sample 17) confirmed that it is made of a copper-zinc alloy (Mazuki, 2023).

Analysis of the USSR coins from 1964 and 1970 (Samples 18, 19) confirmed they were made from cupronickel (a copper-zinc-nickel alloy, often referred to as German silver or Neusilber), known for its silvery colour and high durability. The composition of the European Union coins (2€, 1€, 50¢) and the Ukrainian 2 UAH coin aligns with known minting technologies: bi-metallic alloys for the euro coins (Cu-Zn-Ni and Cu-Ni), the Nordic Gold alloy (Cu-Zn) for the 50¢ coin, steel cores with a coating of copper (1¢) or nickel (2 UAH).

The study of the chemical composition of jewellery, medals, and coins using the XRF method demonstrated its high effectiveness as a non-destructive tool for quality control of precious metals. The significant discrepancies found between the hallmarking and the actual composition, especially in modern items, point to systemic issues in the jewellery market, specifically suggesting possible falsification and non-compliance with established standards.

In particular, it was confirmed that to reduce the cost of gold alloys, silver in the ligature is often replaced with cheaper zinc. Furthermore, an undesirable impurity of nickel, a known allergen, was detected in one of the samples. These results underscore that the XRF methodology is critically important for expert institutions seeking to protect consumers from unscrupulous manufacturers. In contrast, the analysis of historical items, such as the gold coin, confirmed that minting technologies in the past were generally more accurate, and the alloy composition adhered to the declared fineness. The investigation of other metal items, including European Union and Ukrainian coins, also confirmed that their composition aligns with known technologies, such as the use of cupronickel (Neusilber) and Nordic Gold alloys, further demonstrating the reliability of XRF as a method for metal identification across various applications.

Based on the conducted analysis, several key conclusions were drawn:

1. The study confirmed that a significant portion of modern jewellery items deviates from the declared fineness, indicating a mismatch between the marking and their actual chemical composition.

2. It was established that silver in modern gold items is often replaced by cheaper zinc, and the presence of undesirable impurities, such as nickel, was detected in some samples.

3. Analysis of historical gold and silver coins showed that their composition generally corresponds to the declared characteristics, reflecting historical production features.

4. The investigation of coins and other metal products confirmed adherence to established technological standards for minting.

5. Ultimately, the obtained data proves that XRF analysis is an indispensable, rapid, and non-destructive tool for quality control, essential for detecting falsifications in the precious metals market.

#### BIBLIOGRAPHY:

1. Artyukh T., Hryhorenko I., Ternova A., Yaheliuk S., Cernavca M. Influence of the alloy composition on determining the millesimal fineness of gold by X-ray fluorescent and assay analysis. *Eastern-European Journal of Enterprise Technologies*. 2018. Vol. 5. No. 12(95). P. 6–18. <https://doi.org/10.15587/1729-4061.2018.142730>
2. Beckhoff B., Kanngießer B., Langhoff N., Wedell R., Wolff H. (2007). *Handbook of practical X-ray fluorescence analysis*. Springer Science. 2007.
3. Chiojdeanu C., Cristea-Stan D. Gold and silver coating characterization using an X-Ray Fluorescence based method-the case of archaeological artifacts. *Romanian Reports in Physics*. 2011. Vol. 63. No. 3. P. 685–692.
4. Інструкція про порядок здійснення клеймування ювелірних та побутових виробів з дорогоцінних металів, про проведення випробування та експертизи дорогоцінних металів, виробів з них, вставок дорогоцінного каміння,

музейних предметів, які містять дорогоцінні метали і дорогоцінне каміння, відбитків державних пробірних клейм. 1999. URL: <https://zakon.rada.gov.ua/laws/show/z0874-99#Text>

5. Lemberge P. (n.d.). Analysis of gold jewellery with ARL QUANT'X EDXRF Spectrometer. Thermo Fisher Scientific Ecublens.

6. Li H., Shi S.J., Wang X, Zhu Y., Yu N., Wang Y.J. Determination of Gold in Gold Jewelry Alloys by a Synthesis Method. *Advanced Materials Research*. 2015. Vol. 1120-1121. P. 1350–1355. <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/AMR.1120-1121.1350>

7. Mazuki A. A. M., Mahat M. M., Abdullah S., Ramli R., Nor F. M. Improving the accuracy of EDXRF results in gold alloy analysis by matrix effect correction. *Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy*. 2023. Vol. 201. P. 106629. <https://doi.org/10.1016/j.sab.2023.106629>

8. Serrano S., Rodrigues A., Silva R. J. C., Figueiredo E. Study of an Iron Age Gilded Silver Earring by XRF, SEM-EDS and Multifocus OM. *Heritage*. 2023. Vol. 6(5). P. 4187–4201. <https://doi.org/10.3390/heritage6050220>

9. Tkachuk H. S., Navrotska O. Y. Investigation of quality of golden jewelry by X-ray fluorescent method. *Technologies and strategies for the implementation of scientific achievements*. 2022. Vol. 2. P. 36–37.

10. Tkachuk H., Navrotska O. Research of the Composition of Golden and Silver Products by the X-Ray Fluorescent Method. *Scientific Collection "InterConf"*. 2023. Vol. 176. P. 162–166. URL: <https://surl.li/rdxylp>

#### REFERENCES:

1. Artyukh, T., Hryhorenko, I., Ternova, A., Yaheliuk, S., & Cernavca, M. (2018). Influence of the alloy composition on determining the millesimal fineness of gold by X-ray fluorescent and assay analysis. *Eastern-European Journal of Enterprise Technologies*. 5(12(95)). 6–18. <https://doi.org/10.15587/1729-4061.2018.142730>

2. Beckhoff, B., Kanngieber, B., Langhoff, N., Wedell, R., & Wolff, H. (2007). *Handbook of practical X-ray fluorescence analysis*. Springer Science. 2007.

3. Chiojdeanu, C., Cristea-Stan, D. (2011). Gold and silver coating characterization using an X-Ray Fluorescence based method-the case of archaeological artifacts. *Romanian Reports in Physics*. 63(3). 685–692.

4. Instruktsiia pro poriadok zdiisnennia kleimuvannia yuvelirnykh ta pobutovykh vyrobiv z dorohotsinnykh metaliv, pro provedennia vyprobuvannia ta ekspertyz dorohotsinnykh metaliv, vyrobiv z nykh, vstavok dorohotsinnoho kaminnia, muzeinykh predmetiv, yaki mistiat dorohotsinni metaly i dorohotsinne kaminnia [Instruction on the procedure for hallmarking of jewelry and household items made of precious metals, for testing and examination of precious metals, products made of them, inlays of precious stones, museum items containing precious metals and precious stones]. 1999. Retrieved from <https://zakon.rada.gov.ua/laws/show/z0874-99#Text>

5. Lemberge, P. (n.d.). Analysis of gold jewellery with ARL QUANT'X EDXRF Spectrometer. Thermo Fisher Scientific Ecublens.

6. Li, H., Shi, S.J., Wang, X, Zhu, Y., Yu, N., & Wang, Y.J. (2015). Determination of Gold in Gold Jewelry Alloys by a Synthesis Method. *Advanced Materials Research*. 1120–1121. 1350–1355. <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/AMR.1120-1121.1350>

7. Mazuki, A. A. M., Mahat, M. M., Abdullah, S., Ramli, R., & Nor, F. M. (2023). Improving the accuracy of EDXRF results in gold alloy analysis by matrix effect correction. *Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy*. 201. 106629. <https://doi.org/10.1016/j.sab.2023.106629>

8. Serrano, S., Rodrigues, A., Silva, R. J. C., & Figueiredo, E. (2023). Study of an Iron Age Gilded Silver Earring by XRF, SEM-EDS and Multifocus OM. *Heritage*. 6(5). 4187–4201. <https://doi.org/10.3390/heritage6050220>

9. Tkachuk, H. S., & Navrotska, O. Y. (2022). Investigation of quality of golden jewelry by X-ray fluorescent method. *Technologies and strategies for the implementation of scientific achievements*. 2. 36–37.

10. Tkachuk, H., & Navrotska O. (2023). Research of the Composition of Golden and Silver Products by the X-Ray Fluorescent Method. *Scientific Collection "InterConf"*. 176. 162–166. Retrieved from <https://surl.li/rdxylp>

Стаття надійшла: 02.11.2025

Прийнято: 21.11.2025

Опубліковано: 30.12.2025

UDC 547.732:615.01

DOI <https://doi.org/10.32782/pcsd-2025-4-9>**Yuliia KHARCHENKO**

Candidate of Chemical Sciences, Associate Professor, Associate Professor at the Department of Human Biology, Chemistry and Methodology of Teaching Chemistry, Sumy State Pedagogical University named after A. S. Makarenko, 87 Romenska str., Sumy, Ukraine, 40002

**ORCID:** 0000-0002-8960-2440**Scopus Author ID:** 24921271000

**To cite this article:** Kharchenko, Yu. (2025). Amidni pokhidni 1,2,4-oksadiazolu yak perspektyvni ahenty z podviinoiu funghitsydnoiu ta nematotsydnoiu diieiu [Amide derivatives of 1,2,4-oxadiazole as promising agents with dual fungicidal and nematocidal activity]. *Problems of Chemistry and Sustainable Development*, 4, 69–78, doi: <https://doi.org/10.32782/pcsd-2025-4-9>

### AMIDE DERIVATIVES OF 1,2,4-OXADIAZOLE AS PROMISING AGENTS WITH DUAL FUNGICIDAL AND NEMATOCIDAL ACTIVITY

*Fungal and nematode pathogens, which often act synergistically, pose a significant threat to food security. Conventional plant protection methods involve the use of separate fungicides or nematicides, which increases chemical load and promotes the development of resistance. A promising approach is the design of dual-action molecules that can simultaneously suppress both fungal and nematode pathogens. Particular attention is drawn to amide derivatives of 1,2,4-oxadiazole due to their chemical modularity, heteroatomic composition, and favourable toxicity profile. These compounds exhibit a high level of succinate dehydrogenase (SDH) inhibition, leading to the blockade of electron transport, disruption of oxidative phosphorylation, and energy depletion in pathogens.*

*This study employed a systematic review of publications in Scopus, Web of Science, and PubMed. A comparative analysis of synthetic strategies for amide 1,2,4-oxadiazoles was conducted, and data on their fungicidal and nematocidal activities were systematised using structure-activity relationship (SAR) analysis to identify key structural-activity patterns. The analysis demonstrated that maximal activity is achieved through the combination of heteroaromatic substituents (notably pyridyl groups), optimal halogenation, and a flexible amide linker, which ensures proper orientation of the molecule within the enzyme's active site.*

*Key structural fragments responsible for high biological efficacy were identified, and recommendations for optimizing synthetic protocols were proposed. Further optimization can be achieved through modular molecular design, balancing hydrophobicity, and integrating secondary mechanisms of action, including reactive oxygen species generation, while minimizing toxicity and the risk of bioaccumulation (ecological SAR). The introduction of amide 1,2,4-oxadiazole derivatives as innovative dual-action agents presents prospects for enhancing crop productivity, reducing the frequency of applications, and mitigating the development of resistance.*

**Keywords:** 1,2,4-oxadiazole, amide derivatives, synthesis, fungicidal activity, nematocidal activity, succinate dehydrogenase (SDH), structure-activity relationships (SAR).

**Юлія ХАРЧЕНКО**

кандидат хімічних наук, доцент, доцент кафедри біології людини, хімії та методики навчання хімії, Сумський державний педагогічний університет імені А. С. Макаренка, вул. Роменська, 87, м. Суми, Україна, 40002

**ORCID:** 0000-0002-8960-2440**Scopus Author ID:** 24921271000

**Бібліографічний опис статті:** Харченко, Ю. (2025). Амідні похідні 1,2,4-оксадіазолу як перспективні агенти з подвійною фунгіцидною та нематоцидною дією. *Проблеми хімії та сталого розвитку*, 4, 69–78, doi: <https://doi.org/10.32782/pcsd-2025-4-9>

## АМІДНІ ПОХІДНІ 1,2,4-ОКСАДІАЗОЛУ ЯК ПЕРСПЕКТИВНІ АГЕНТИ З ПОДВІЙНОЮ ФУНГІЦИДНОЮ ТА НЕМАТОЦИДНОЮ ДІЄЮ

Грибкові та нематодні патогени, що часто діють синергічно, становлять серйозну загрозу продовольчій безпеці. Традиційні методи захисту рослин передбачають застосування окремих фунгіцидів або нематодцидів, що підвищує хімічне навантаження та сприяє розвитку резистентності. Перспективним підходом є розробка молекул подвійної дії, здатних одночасно пригнічувати грибкові та нематодні патогени. Особливу увагу привертають амідні похідні 1,2,4-оксадіазолу завдяки їх хімічній модульності, гетероатомному складу та сприятливому профілю токсичності. Ці сполуки демонструють високий рівень інгібування сукцинатдегідрогенази (SDH), що призводить до блокування електронного транспорту, порушення окислювального фосфорилування та енергетичного виснаження патогенів.

У роботі використано систематичний огляд публікацій у базах Scopus, Web of Science та PubMed. Проведено порівняльний аналіз синтетичних стратегій амідних 1,2,4-оксадіазолів та систематизовано дані щодо їх фунгіцидної та нематодцидної активності з застосуванням SAR-аналізу для виявлення структурно-активних закономірностей. Аналіз показав, що максимальна активність досягається при поєднанні гетероароматичних замісників (зокрема піридинських), оптимального галогенування та гнучкого амідного лінкера, що забезпечує правильну орієнтацію молекули у активному сайті ферменту.

Виявлено ключові структурні фрагменти, що визначають високу біологічну ефективність, та запропоновано рекомендації щодо оптимізації синтетичних протоколів. Подальша оптимізація може бути здійснена шляхом модульного дизайну молекул, досягнення балансу гідрофобності та інтеграції вторинних механізмів дії, зокрема генерації активних форм кисню, із зменшенням токсичності та ризику біоаккумуляції (екологічний SAR). Впровадження амідних похідних 1,2,4-оксадіазолу як інноваційних агентів подвійної дії відкриває перспективи підвищення продуктивності агрокультур, зменшення частоти обробок та стримування розвитку резистентності.

**Ключові слова:** 1,2,4-оксадіазол, амідні похідні, синтез, фунгіцидна активність, нематодцидна активність, сукцинатдегідрогеназа (SDH), структурно-активні зв'язки (SAR).

**Relevance of the Problem.** Global food security remains under constant pressure from biotic factors, including pathogens and pests, which cause substantial damage to agricultural crops. According to expert estimates, crop losses worldwide due to their impact can reach 20–40 % (Yu, 2025).

A particular threat arises from the simultaneous infection of plants by fungi and nematodes, which often results in synergistic interactions: cumulative losses exceed the additive effect of individual pathogens (Liu, 2022). Among known plant pathogens, more than 8,000 fungal species cause diseases, including *Fusarium graminearum*, *Botrytis cinerea*, *Sclerotinia sclerotiorum*, *Rhizoctonia solani*, *Blumeria* spp., *Pythium* spp., *Colletotrichum* spp., *Puccinia* spp., and *Phytophthora* spp., accounting for approximately 85 % of all crop diseases (Dang, 2011). Concurrently, plant-parasitic nematodes such as *Meloidogyne incognita*, *Aphelenchoides besseyi*, and *Bursaphelenchus xylophilus* inflict severe damage on agriculture (Xie, 2019). Their combined synergistic impact highlights the urgent need for universal control agents, including the development of new chemical compounds with dual activity capable of simultaneously targeting both classes of pests (Liu, 2022).

Conventional plant protection strategies rely on the separate application of fungicides or nematicides, necessitating the combination of multiple agents, which increases costs and environmental load. Dual-activity molecules that simultaneously suppress both fungi and nematodes offer a more efficient approach to pathogen control while reducing overall pesticide burden.

One promising strategy for developing dual-action agrochemicals is the use of the 1,2,4-oxadiazole scaffold. Its advantages include:

- heteroatomic nature: the presence of oxygen and nitrogen atoms facilitates specific interactions with biological targets, particularly enzymes.
- chemical modularity: variations in substituents on the ring carbon atoms and functional groups (amides, halogens, CF<sub>3</sub>, etc.) allow fine-tuning of physicochemical properties (pKa, lipophilicity) and bioactivity.
- safety and stability: the 1,2,4-oxadiazole structure is already employed in known agrochemicals (e.g., the nematicide thioxazafen) (Ju, 2023), demonstrating a favourable toxicity profile and synthetic accessibility.

The integration of 1,2,4-oxadiazole-based dual-action molecules into crop protection systems presents a promising approach for the simultaneous control of fungal and nematode pathogens,

reduction of chemical load, and enhancement of agroecosystem resilience.

#### Analysis of Recent Studies and Publications.

Nitrogen-containing heterocyclic structures, particularly oxadiazole derivatives, occupy a prominent position in contemporary medicinal chemistry and the development of new bioactive compounds. Notably, approximately three-quarters of modern herbicides and pesticides contain at least one heterocyclic ring (Gomtsyan, 2012). The high biological activity of these structures is attributed to their ability to participate in a wide range of intramolecular interactions – van der Waals, hydrophobic, hydrogen bonding, and coordination – which facilitates effective binding to catalytic centres and allosteric sites of biological targets (Kumar, 2022). Consequently, oxadiazole heterocycles are regarded as one of the most valuable pharmacophores today.

In recent years, the 1,2,4-oxadiazole core has established itself as a versatile structural scaffold, both in the design of pharmaceutical agents (fig. 1) (Biernacki, 2020, Kumar, 2024) and in the development of highly active agrochemicals (Fu, 2024, Zhao, 2024, Zhong, 2023, Chen, 2025).

A key trend in recent years has been the growing interest in 1,2,4-oxadiazole as a scaffold for designing succinate dehydrogenase inhibitors (SDHIs) (Hu, 2025, Yu, 2025). SDHIs have long held a leading position in the fungicide market, but pathogen resistance and the structural conservatism of their mechanism of action underscore the need for new molecular classes. In this context, amide-substituted 1,2,4-oxadiazoles emerge as a promising direction: their electronic structure, aromaticity, and ability to form specific intermolecular interactions make the oxadiazole scaffold suitable for precise modulation of interactions within the SDH Q-domain. Thus, amide 1,2,4-oxadiazoles represent a natural extension of this trend, offering a novel approach to inhibiting the respiratory chain of fungal and nematode pathogens.

In agrochemical design, the principle of active substructure splicing – combining multiple biologically relevant substructures into a single hybrid molecule – is widely employed. For amide 1,2,4-oxadiazoles, this involves linking two or more aromatic or heteroaromatic fragments via the oxadiazole ring and the amide moiety (Ou, 2025).

Recently, several new nematicides containing amide fragments with broad-spectrum and sufficiently high activity have been reported (Flemming, 2025, Liu, 2022, Lahm, 2017, Schleker, 2022, Thompson, 2024). Among them are fluopyram, fluazaindoline, and cyclobutrifluram (fig. 2).

Notably, fluopyram has demonstrated high efficacy against a broad spectrum of phytoparasitic nematodes (Jeschke, 2017, Miles, 2014, Schleker, 2022), confirming the effectiveness of the amide fragment in designing novel nematicides. The amide moiety is not merely a chemical linker; it serves as a critical molecular bridge with dual functional significance. First, the amide provides structural flexibility necessary for optimal ligand orientation within the SDH active pocket. Second, it contains key donor and acceptor sites (NH and C=O groups) to form stabilising hydrogen bonds with amino acid residues of the target protein. As demonstrated by recent studies (Liu, 2022), newly synthesised compounds containing an amide fragment exhibit biological activity comparable to modern commercial fungicides, highlighting the pivotal role of the amide bridge in enzyme inhibition.

Analysis of recent literature indicates that SDH inhibitors remain one of the most dynamic areas in the development of new fungicides (Liu, 2022, Wang, 2021, Yan, 2018). Their mechanism of action involves blocking SDH, an enzyme simultaneously involved in the tricarboxylic acid cycle and the mitochondrial respiratory chain (Cecchini, 2003, Sun, 2005). Molecular modification via the amide bridge allows the creation of a novel enzyme binding mode, potentially circumventing existing

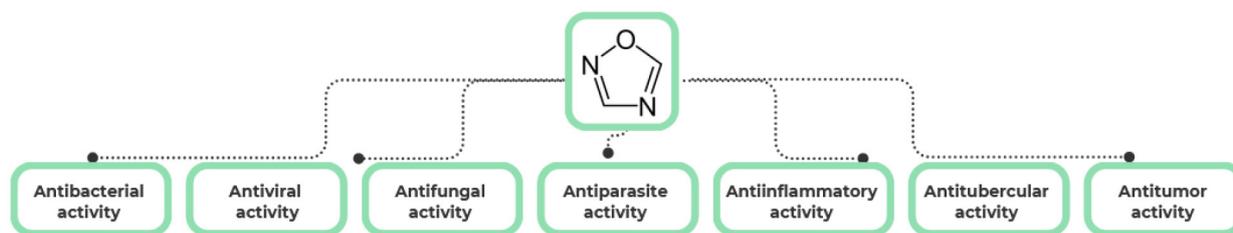
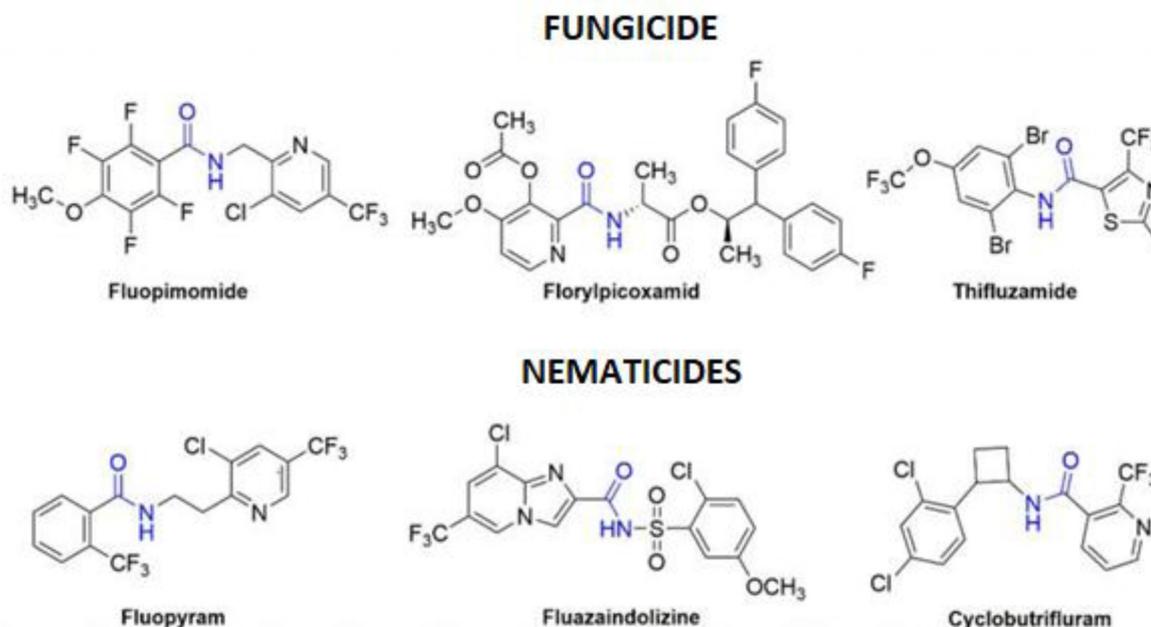


Fig. 1. Pharmacological activity of 1,2,4-oxadiazole derivatives



**Fig. 2. Structures of reported antifungal and nematocidal compounds containing amide or 1,2,4-oxadiazole fragments**

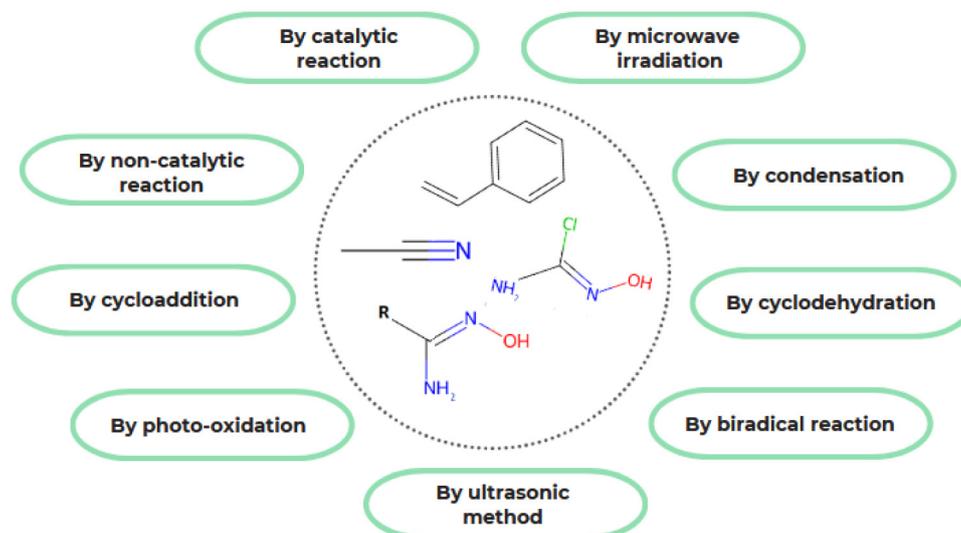
resistance (Miyamoto, 2020, Wang, 2021). Notably, well-known SDHI fungicides – fluopimomid, florilpicoxamide, tifluzamid – and nematocides fluazaindolizine and cyclobutrifluram (fig. 2) all contain an amide linkage. This highlights that incorporating amide fragments into the structures of new 1,2,4-oxadiazoles is a key strategy for developing selective fungicides and nematocides.

**Research Objective.** The objective of this study is to summarise current data on the structural features, synthetic strategies, and SAR profiles of amide-substituted 1,2,4-oxadiazoles as a promising class of dual-action agrochemicals with simultaneous fungicidal and nematocidal activity,

and to identify the key factors that determine their biological efficacy.

#### Presentation of the Main Research Material.

The synthesis of amide 1,2,4-oxadiazoles typically involves two key stages: the formation of the heterocyclic core (Kumar, 2024) (fig. 3) and subsequent functionalisation with an amide moiety. The primary pathways for constructing the 1,2,4-oxadiazole ring involve cyclisation reactions, particularly the reaction of hydroxamidochlorides with nitriles, which yields a compact and stable scaffold. After formation of the heterocyclic core, the introduction of the amide fragment is a critical step for modulating biological activity.



**Fig. 3. Synthetic approaches for obtaining the 1,2,4-oxadiazole ring**

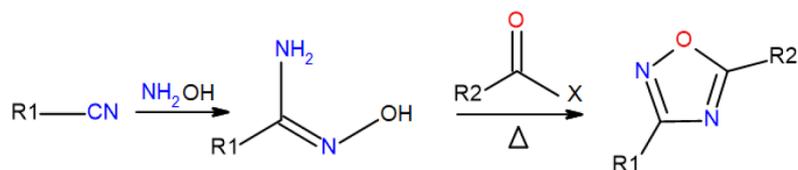


Fig. 4. General approach to the synthesis of the 1,2,4-oxadiazole ring

A typical standard synthetic approach, employed by numerous authors (Fu, 2024, Kharchenko, 2008, Kharchenko, 2009, Liu, 2019, Liu, 2022, Liu, 2025, Ou, 2025, Zhong, 2023, Zhu, 2025), involves the synthesis of amidoximes via the reaction of substituted nitriles with hydroxylamine hydrochloride, followed by cyclocondensation of the resulting amidoximes with anhydrides or acyl chlorides of carboxylic acids or their synthetic equivalents (Fig. 4).

For example, the authors of the work (Liu, 2022) conducted a synthesis (fig. 5) based on various (hetero)aromatic nitriles with hydroxylamine. Amidoximes **A** were synthesised and then treated with ethyl oxalyl chloride in acetonitrile. The resulting esters **B** were hydrolysed with LiOH in ethanol to yield acids **C**. Compounds **C** reacted with oxalyl chloride to form chloroanhydrides **D**, which were subsequently converted into target amides **F1–F24** via reaction with primary amines.

This modular approach allows for rapid variation of the Ar1 and Ar2 substituents, typically halogenated phenyls or heterocycles (fig. 5), enabling straightforward modification of one of the aromatic substituents for quick investigation of structure-activity relationships (SAR).

According to Liu (2022), all obtained compounds (**F1–F24**) exhibited moderate to high mycelial growth inhibition at a concentration of 50 mg/mL. Notably, compounds **F3**, **F15**, **F18** and **F20** showed good antifungal activity against *B. cinerea*, with inhibition rates of 56.8 %, 58.2 %, 55.9 % and 55.8 %, respectively. These values, however, were lower than those for reference agents fluopyram (87.3 %) and tifluzamid (80.3 %) (fig. 1). In contrast, compounds **F1**, **F3**, **F9**, **F14** and **F15** exhibited high antifungal activity against *S. sclerotiorum*, with inhibition rates of 73.2 %, 84.85 %, 61.1 %, 65.2 % and 89.3 %, respectively. Compound **F15** demonstrated particularly high efficacy against *S. sclerotiorum* ( $EC_{50} \approx 2.9$  mg/mL),

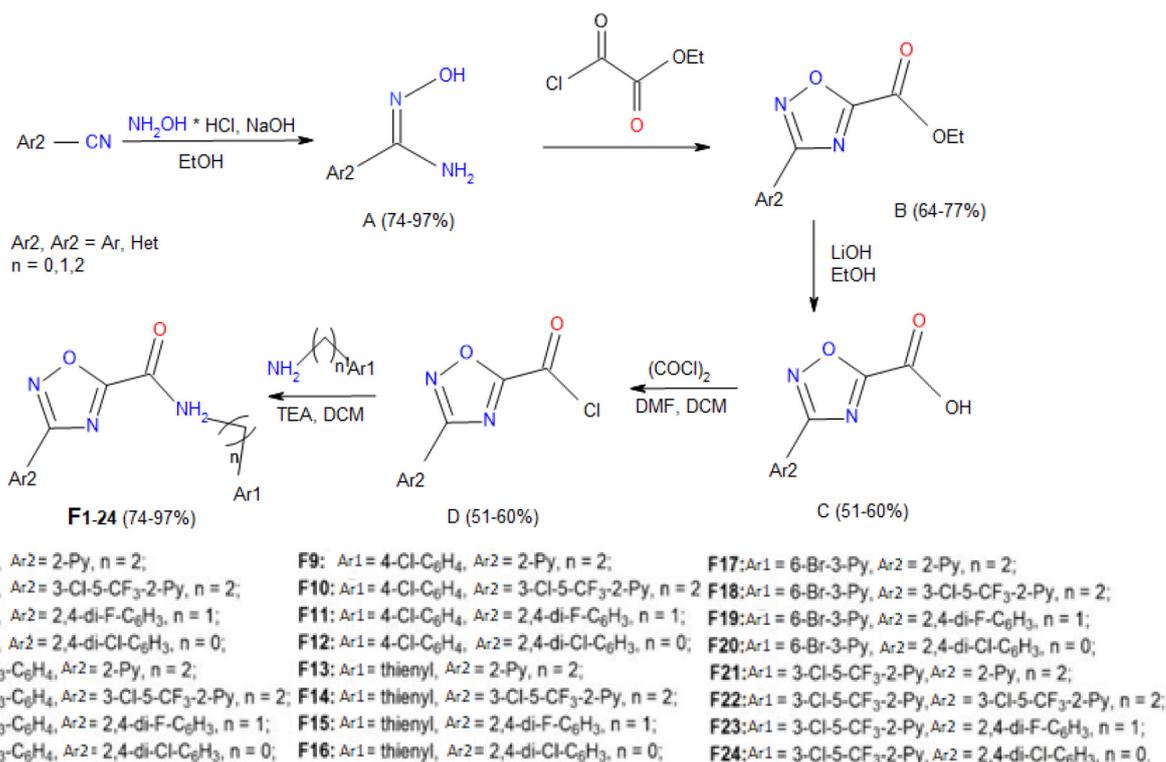


Fig. 5. Synthetic scheme

which is comparable to tfluzamid (4.3 mg/mL) and fluopyram (1.2 mg/mL) (Li, 2022). Morphological analysis revealed that **F15** induced abnormal collapse and wrinkling of *S. sclerotiorum* hyphae, thereby directly inhibiting pathogen growth.

SAR analysis of these 1,2,4-oxadiazoles showed that the presence of an aryl substituent at C(3) and  $\beta$ -arylethylamine groups resulted in higher activity against *B. cinerea* and *S. sclerotiorum* for compounds with an unsubstituted pyridine ring compared to those with trifluoromethyl or chloro-substituted pyridine. This is exemplified by the following activity profiles of 1,2,4-oxadiazoles bearing substituted and unsubstituted pyridine rings against *S. sclerotiorum* and *B. cinerea*: **F1** (73.2 % and 24.2 %) > **F2** (48.6 % and 23.6 %); **F5** (56.3 % and 24.9 %) > **F6** (56.0 % and 22.9 %); **F9** (61.1 % and 26.7 %) > **F10** (48.6 % and 24.2 %). When a heterocyclic substituent was introduced at C3, the trend shifted as follows: **F14** (65.2 % and 36.4 %) > **F13** (41.1 % and 27.3 %); **F18** (34.9 % and 55.9 %) > **F17** (10.1 % and 27.6 %); **F22** (37.6 % and 45.2 %) > **F21** (35.1 % and 38.8 %). The highest activity was observed for compounds with  $n = 1$  and a 2,4-difluorophenyl group: **F3** (41.1 % and 27.3 %) > **F1** (73.2 % and 24.2 %); **F15** (89.3 % and 58.2 %) > **F13** (41.1 % and 27.3 %). Additionally, the antifungal effect of thiophenyl-substituted compounds was significantly higher than that of compounds with other substituents: **F15** (89.3 % and 58.2 %) > **F3** (41.1 % and 27.3 %) > **F7** (56.4 % and 46.4 %) > **F11** (44.9 % and 44.2 %) > **F23** (34.6 % and 41.5 %). Comparison of series with identical substituents showed the lowest activity for compounds with a 2,4-dichlorophenyl group and  $n = 0$  (**F15** (89.3 % and 58.2 %) > **F14** (65.2 % and 36.4 %) > **F13** (41.1 % and 27.3 %) > **F16**

(39.6 % and 25.5 %). At the same time, introducing the 2,4-difluorophenyl moiety at  $n = 1$  (**F15**) led to superior antifungal activity toward both *B. cinerea* and *S. sclerotiorum*. These results indicate that a large steric load of the R substituent generally has a negative effect on fungicidal activity.

The in vitro results were confirmed in vivo for the leading compound **F15**: it effectively controlled *S. sclerotiorum*-induced disease on cabbage leaves, demonstrating protective and curative effects of 62.3 % and 71.0 % at a dose of 100 mg/mL. Moreover, the application of **F15** visibly disrupted the hyphal morphology of *S. sclerotiorum*.

Another study (Schleker, 2022) focused on the structural modification of fluopyram. The flexible ethyl linker connecting the amide and pyridine fragments was replaced in target compounds with a rigid 1,2,4-oxadiazole ring. A one-pot procedure was developed involving the cyclisation of amidoximes with benzoyl chlorides, followed by the removal of the tert-butoxycarbonyl protecting group from the intermediates, yielding free amino intermediates that were acylated in situ to obtain the target compounds. All target amide 1,2,4-oxadiazoles were tested for nematocidal activity, and some demonstrated very promising results.

The analysis of SAR and positional effects of the amide fragment in the target compounds revealed two key aspects: the site of attachment and the nature of the linker. The amide fragment can be introduced at the C(3) position (series **A**) or C(5) position (series **B**, **C**) of the 1,2,4-oxadiazole ring (Ou, 2025) (fig. 6).

Studies of nematocide series **A–C** showed that amide introduction at either position maintains high activity (Ou, 2025). However, within series **A**, when the amide fragment was introduced at position

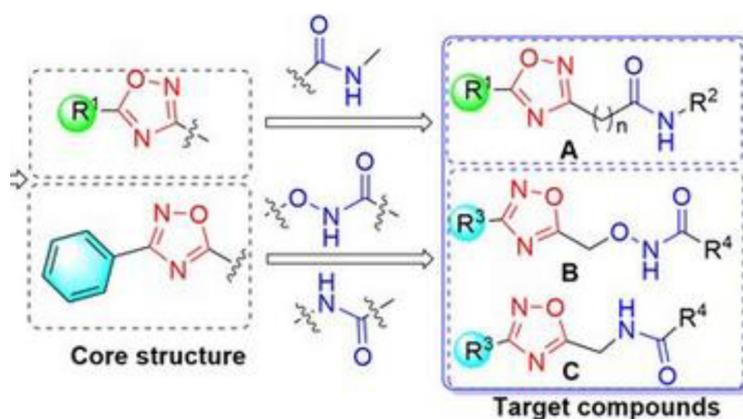


Fig. 6. Target product structures (Ou, 2025)

3 and  $R1 = 2\text{-CF}_3\text{-C}_6\text{H}_4$  of 1,2,4-oxadiazole, the activity of the monosubstituted  $R2$  compound was higher than that of the disubstituted  $R2$  counterpart; e.g., **A13** ( $R2 = 4\text{-CF}_3\text{-C}_6\text{H}_4$ , 35.5 %) > **A11** ( $R2 = 2\text{-Cl-4-CF}_3\text{-C}_6\text{H}_3$ , 27.1 %). The position of the substituent in the aryl  $R2$  group also matters. Ortho-substituted  $R2$  aryl groups enhance nematocidal activity against *B. xylophilus*. For example, with  $R1 = 2\text{-CF}_3\text{-C}_6\text{H}_4$ , introducing a  $\text{CF}_3$  group at the 2-position of the benzene ring  $R2$  increases activity: **A14** ( $R2 = 2\text{-CF}_3\text{-C}_6\text{H}_4$ , 45.3 %) > **A13** ( $R2 = 4\text{-CF}_3\text{-C}_6\text{H}_4$ , 35.5 %). Bulky ortho-substituents (e.g., 2-trifluoromethylphenyl in  $R2$ ) further enhance activity, likely due to optimal filling of the nematode SDH active site (Wang, 2024).

Another critical factor is the nature and length of the amide linker. Comparative analysis of nematocidal activity between series **C** and **B** showed that the absence of an oxygen atom in the linker (i.e., using an amide instead of another linkage type) increased activity by nearly 30 %. This may be explained by the more hydrophobic environment around the linker, optimising interactions with the SDH active site in nematodes. Oxygen presence can create undesired hydrogen bonds and increase molecular polarity, reducing efficacy (Ou, 2025). Meanwhile, for the fungicidal compound **F15** (Liu, 2022), a spacer  $n = 1$  was used, representing an additional methylene linker between the oxadiazole core and the amide group. Control over linker nature and length enables the tuning of lipophilicity (log P), which is crucial for compound penetration into pathogen cells and for influencing the ecotoxicological profile.

Interestingly, introduction of an electron-withdrawing group  $R3$  in series **C** target compounds (Ou, 2025) enhanced nematocidal activity against *B. xylophilus*, e.g., **C1** ( $R3 = 4\text{-F-C}_6\text{H}_4$ , 38.8 %) > **C2** ( $R3 = 4\text{-Cl-C}_6\text{H}_4$ , 32.5 %) > **C5** ( $R3 = \text{C}_6\text{H}_5$ , 29.8 %) > **C4** ( $R3 = 4\text{-CH}_3\text{-C}_6\text{H}_4$ , 25.6 %). Conversely, introducing an acceptor group at **R4** =  $2\text{-CF}_3\text{-C}_6\text{H}_4$  with an ortho-chloro atom in  $R3$  reduced activity: **C3** ( $R3 = 4\text{-CF}_3\text{-C}_6\text{H}_4$ ,

90.7 %) > **C6** ( $R3 = 2\text{-Cl-4-CF}_3\text{-C}_6\text{H}_3$ , 30.8 %).

Thus, recent studies confirm the high fungicidal activity of amide 1,2,4-oxadiazoles, which is comparable to that of commercial SDHI fungicides.

**Conclusions and Prospects for Further Research.** The analysis of recent scientific literature reveals a sustained increase in interest in dual-action molecules that exhibit both fungicidal and nematocidal activity, driven by the prevalence of combined infections and the emergence of pathogen resistance to conventional SDHI-based agents. Amidic 1,2,4-oxadiazoles represent a promising class of such dual-active agents capable of effectively suppressing pathogenic fungi and nematodes. Their bioactivity is primarily associated with the inhibition of succinate dehydrogenase (SDH), leading to the blockade of electron transport, disruption of oxidative phosphorylation, and rapid energy depletion in the pathogens.

SAR analysis confirmed that maximal biological activity is achieved through the combination of heteroaromatic substituents, optimal halogenation, and a flexible amidic linker, which ensures proper molecular orientation within the enzyme's active site. The hydrophobic–hydrophilic balance (log P) determines the compounds' ability to penetrate pathogen tissues while maintaining sufficient solubility. A comparative evaluation of the fungicidal and nematocidal effects indicates that amidic 1,2,4-oxadiazole derivatives can serve as a foundation for the development of innovative dual-action agrochemicals.

Future research should focus on the modular design of molecules to maintain stable interactions with SDH while preserving the flexibility of the amidic linker, as well as optimal combinations of hydrophobic and heteroaromatic fragments. Additionally, it should assess secondary modes of action and eco-SAR to minimise toxicity and reduce the risk of bioaccumulation.

The implementation of such compounds opens new prospects for the development of effective, safe, and sustainable next-generation agrochemicals.

#### BIBLIOGRAPHY:

1. Biernacki K., Daško M., Ciupak O., Kubiński K., Rachon J., Demkowicz S. Novel 1,2,4-oxadiazole derivatives in drug discovery. *Pharmaceuticals (Basel)*. 2020. Vol. 13(6). 111. DOI: <https://doi.org/10.3390/ph13060111>
2. Cecchini G. Function and structure of complex II of the respiratory chain. *Annual Review of Biochemistry*. 2003. Vol. 72. P. 77–109. DOI: <https://doi.org/10.1146/annurev.biochem.72.121801.161700>
3. Chen X., Wang S., Du T., Zhang Y., Zhao X., Chen J. Design, synthesis, and nematocidal activity of novel amide derivatives containing a 1,2,4/1,3,4-oxadiazole moiety against *Bursaphelenchus xylophilus*. *J. Agric. Food Chem.* 2025. Vol. 73(12). P. 7166–7178. DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.jafc.4c13159>

4. Dang Q. L., Kim W. K., Nguyen C. M., Choi Y. H., Choi G. J., Jang K. S., et al. Nematicidal and antifungal activities of annonaceous acetogenins from *Annona squamosa* against various plant pathogens. *J. Agric. Food Chem.* 2011. Vol. 59. P. 11160–11167. DOI: <https://doi.org/10.1021/jf203017f>
5. Flemming A., Guest M., Luksch T., O'Sullivan A., Screpanti C., Dumeunier R., et al. The discovery of Cyclobutrifluram, a new molecule with powerful activity against nematodes and diseases. *Pest Management Science.* 2025. Vol. 81. P. 2480–2490. DOI: <https://doi.org/10.1002/ps.8730>
6. Fu W., Yuan Q., Zhang H., Li X., Lu Y., Yan W., et al. Novel SDH inhibitors as antifungal leads: From azobenzene derivatives to the 1,2,4-oxadiazole compounds. *J. Agric. Food Chem.* 2024. Vol. 72. P. 24272–24282.
7. Gomtsyan A. Heterocycles in drugs and drug discovery. *Chemistry of Heterocyclic Compounds.* 2012. Vol. 48. P. 7–10.
8. Hu X., Miao J., Tian Y., Luo W., Shang J., Liu R., Lu H. Design, synthesis and herbicidal activity of 1,2,4-oxadiazole compounds as novel light-dependent protochlorophyllide oxidoreductase inhibitors. *Molecules.* 2025. Vol. 30(19). 3970. DOI: <https://doi.org/10.3390/molecules30193970>
9. Jeschke P. Latest generation of halogen-containing pesticides. *Pest Management Science.* 2017. Vol. 73(6). P. 1053–1066. DOI: <https://doi.org/10.1002/ps.4540>
10. Kharchenko Y., Detistov O., Orlov V. Polycyclic systems containing 1,2,4-oxadiazole ring 2. 4-(1,2,4-Oxadiazol-5-yl)pyrrolidin-2-ones: Synthesis and prediction of biological activity. *Chemistry of Heterocyclic Compounds.* 2008. Vol. 44. P. 600–605. DOI: <https://doi.org/10.1007/s10593-008-0080-y>
11. Kharchenko J. V., Detistov O. S., Orlov V. D. Synthesis of substituted 5-(1,2,4-oxadiazol-5-yl)-3,4-dihydropyrimidine-2(1H)-thiones. *Journal of Combinatorial Chemistry.* 2009. Vol. 11(2). P. 216–219. DOI: <https://doi.org/10.1021/cc800111h>
12. Kumar G., Kumar R., Mazumder A., Salahuddin H., Singh U., Kumar M. M. A., Shahar Yar N., Kumar N. Insight into the synthesis, biological activity, and structure–activity relationship of 1,2,4-oxadiazole and analogs: A comprehensive review. *Letters in Drug Design & Discovery.* 2024. Vol. 21(9). P. 1437–1464. DOI: <https://doi.org/10.2174/1570180820666230330105308>
13. Kumar N., Goel N. Heterocyclic compounds: Importance in anticancer drug discovery. *Anticancer Agents in Medicinal Chemistry.* 2022. Vol. 22. P. 3196–3207. DOI: [10.2174/1871520622666220404082648](https://doi.org/10.2174/1871520622666220404082648)
14. Lahm G. P., Desaegeer J., Smith B. K., Pahutski T. F., Rivera M. A., Meloro T., et al. The discovery of fluazaindoline: A new product for the control of plant parasitic nematodes. *Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters.* 2017. Vol. 27(7). P. 1572–1575. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.bmcl.2017.02.029>
15. Liu D., Luo L., Wang Z., Ma X., Gan X. Design, synthesis and antifungal/nematicidal activity of novel 1,2,4-oxadiazole derivatives containing amide fragments. *Int. J. Mol. Sci.* 2022. Vol. 23(3). 1596. DOI: <https://doi.org/10.3390/ijms23031596>
16. Liu M. M., Liang Y. R., Zhu Z. Z., Wang J., Cheng X. X., et al. Discovery of novel aryl carboxamide derivatives as hypoxia-inducible factor 1 $\alpha$  signaling inhibitors with potent anticancer metastasis activity. *Journal of Medicinal Chemistry.* 2019. Vol. 62. P. 9299–9314. DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.jmedchem.9b01313>
17. Liu X.-H., Fu C.-H., Wang J., Wei Y.-C., Tan C.-X., Weng J.-Q., et al. Novel 5-(trifluoromethyl)-1,2,4-oxadiazole-based pyrimidin-4-ether HDAC inhibitors for controlling rust disease. *J. Agric. Food Chem.* 2025. Vol. 73(8). P. 4563–4573. DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.jafc.4c09039>
18. Miles T. D., Miles L. A., Fairchild K. L., Wharton P. S. Screening and characterization of resistance to succinate dehydrogenase inhibitors in *Alternaria solani*. *Plant Pathology.* 2014. Vol. 63(1). P. 155–164. DOI: <https://doi.org/10.1111/ppa.12077>
19. Miyamoto T., Hayashi K., Okada R., Wari D., Ogawara T. Resistance to succinate dehydrogenase inhibitors in field isolates of *Podosphaera xanthii* on cucumber. *Pesticide Biochemistry and Physiology.* 2020. Vol. 169. 104646. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.pestbp.2020.104646>
20. Ou Y., Guo X., Zhang Q., Zhang W., Gan X. Design, synthesis, and nematicidal activity of novel 1,2,4-oxadiazole derivatives containing amide fragments. *Molecular Diversity.* 2025. Vol. 29. P. 2293–2304. DOI: <https://doi.org/10.1007/s11030-024-10992-9>
21. Schleker A. S. S., Rist M., Matera C., Damijonaitis A., Collienne U., et al. Mode of action of fluopyram in plant-parasitic nematodes. *Scientific Reports.* 2022. Vol. 12(1). 11954. DOI: <https://doi.org/10.1038/s41598-022-15782-7>
22. Sun F., Huo X., Zhai Y., Wang A., Xu J., Su D., Bartlam M., Rao Z. Crystal structure of mitochondrial respiratory membrane protein complex II. *Cell.* 2005. Vol. 121. P. 1043–1057. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cell.2005.05.025>
23. Thompson H., Peris-Felipo F. J., Peranginangin N., Pocock M., Gayan-Quijano A. L. Cyclobutrifluram (TYMIRIUM® technology): Low risks... *Crop Protection.* 2024. Vol. 184. 106822. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cropro.2024.106822>
24. Wang M. L., Du Y., Ling C., Yang Z. K., Jiang B. B., Duan H. X., et al. Design, synthesis and antifungal/anti-oomycete activity of pyrazolyl oxime ethers. *Pest Management Science.* 2021. Vol. 77. P. 3910–3920. DOI: <https://doi.org/10.1002/ps.6418>

25. Wang Y., Song H., Wang S., Cai Q., Chen J. Design, synthesis, nematicidal activity, and mechanism of novel amide derivatives containing a 1,2,4-oxadiazole moiety. *J. Agric. Food Chem.* 2024. Vol. 72(1). P. 128–139. DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.jafc.3c04945>
26. Xie J. L., Yang F., Wang Y. P., Peng Y. L., Ji H. L. Studies on the efficiency of different inoculation methods of rice white-tip nematode. *Nematology*. 2019. Vol. 21. P. 673–678. DOI: <https://doi.org/10.1163/15685411-00003244>
27. Yan Z., Liu A., Huang M., Liu M., Pei H., et al. Design, synthesis, DFT study and antifungal activity of pyrazolecarboxamide derivatives. *Eur. J. Med. Chem.* 2018. Vol. 149. P. 170–181. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ejmech.2018.02.036>
28. Yu L., Yang K., Yao L., Wang N., Kang H., Yao G., et al. Synthesis and antifungal activity of 1,2,4-oxadiazole derivatives. *Molecules*. 2025. Vol. 30(8). 1851. DOI: <https://doi.org/10.3390/molecules30081851>
29. Zhao L., Wang B., Zhang Y., Zhang C. et al. Design, synthesis, nematicidal, and fungicidal activities of novel azo and azoxy compounds. *J. Agric. Food Chem.* 2024. Vol. 72(10). P. 2473–2481. DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.jafc.3c04847>
30. Zhong L., Wu C., Li M., Wu J., Chen Y., Ju Z., Tan C. 1,2,4-Oxadiazole as a potential scaffold in agrochemistry: A review. *Org. Biomol. Chem.* 2023. Vol. 21(37). P. 7511–7524. DOI: <https://doi.org/10.1039/D3OB00934C>
31. Zhu M., Du T., Zhang Y., Chen W., Zhu Z., Lu S., Chen J. Novel amide derivatives containing an 1,2,4-oxadiazole moiety as potential SDH inhibitors. *Pest Management Science*. 2025. Vol. 81(9). P. 5234–5249. DOI: <https://doi.org/10.1002/ps.8878>

### REFERENCES:

1. Biernacki, K., Daško, M., Ciupak, O., Kubiński, K., Rachon, J., & Demkowicz, S. (2020). Novel 1,2,4-oxadiazole derivatives in drug discovery. *Pharmaceuticals (Basel)*, 13(6), 111. <https://doi.org/10.3390/ph13060111>
2. Cecchini, G. (2003). Function and structure of complex II of the respiratory chain. *Annual Review of Biochemistry*, 72, 77–109. <https://doi.org/10.1146/annurev.biochem.72.121801.161700>
3. Chen, X., Wang, S., Du, T., Zhang, Y., Zhao, X., & Chen, J. (2025). Design, synthesis, and nematicidal activity of novel amide derivatives containing a 1,2,4/1,3,4-oxadiazole moiety against *Bursaphelenchus xylophilus*. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 73(12), 7166–7178. <https://doi.org/10.1021/acs.jafc.4c13159>
4. Dang, Q. L., Kim, W. K., Nguyen, C. M., Choi, Y. H., Choi, G. J., Jang, K. S., Park, M. S., Lim, C. H., Luu, N. H., & Kim, J. C. (2011). Nematicidal and antifungal activities of annonaceous acetogenins from *Annona squamosa* against various plant pathogens. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 59, 11160–11167. <https://doi.org/10.1021/jf203017f>
5. Flemming, A., Guest, M., Luksch, T., O’Sullivan, A., Screpanti, C., Dumeunier, R., Gaberthüel, M., Godineau, E., Harlow, P., Jeanguenat, A., Kurtz, B., Maienfisch, P., Mondière, R., & Pierce, A. (2025). The discovery of Cyclobutrifluram, a new molecule with powerful activity against nematodes and diseases. *Pest Management Science*, 81, 2480–2490. <https://doi.org/10.1002/ps.8730>
6. Fu, W., Yuan, Q., Zhang, H., Li, X., Lu, Y., Yan, W., et al. (2024). Novel SDH inhibitors as antifungal leads: From azobenzene derivatives to the 1,2,4-oxadiazole compounds. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 72, 24272–24282.
7. Gomtsyan, A. (2012). Heterocycles in drugs and drug discovery. *Chemistry of Heterocyclic Compounds*, 48, 7–10.
8. Hu, X., Miao, J., Tian, Y., Luo, W., Shang, J., Liu, R., & Lu, H. (2025). Design, synthesis and herbicidal activity of 1,2,4-oxadiazole compounds as novel light-dependent protochlorophyllide oxidoreductase inhibitors. *Molecules*, 30(19), 3970. <https://doi.org/10.3390/molecules30193970>
9. Jeschke, P. (2017). Latest generation of halogen-containing pesticides. *Pest Management Science*, 73(6), 1053–1066. <https://doi.org/10.1002/ps.4540>
10. Kharchenko, Y., Detistov, O., & Orlov, V. (2008). Polycyclic systems containing 1,2,4-oxadiazole ring 2. 4-(1,2,4-Oxadiazol-5-yl)pyrrolidin-2-ones: Synthesis and prediction of biological activity. *Chemistry of Heterocyclic Compounds*, 44, 600–605. <https://doi.org/10.1007/s10593-008-0080-y>
11. Kharchenko, J. V., Detistov, O. S., & Orlov, V. D. (2009). Synthesis of substituted 5-(1,2,4-oxadiazol-5-yl)-3,4-dihydropyrimidine-2(1H)-thiones. *Journal of Combinatorial Chemistry*, 11(2), 216–219. <https://doi.org/10.1021/cc800111h>
12. Kumar, G., Kumar, R., Mazumder, A., Salahuddin, H., Singh, U., Kumar, M. M. A., Shahar Yar, N., & Kumar, N. (2024). Insight into the synthesis, biological activity, and structure-activity relationship of 1,2,4-oxadiazole and analogs: A comprehensive review. *Letters in Drug Design & Discovery*, 21(9), 1437–1464. <https://doi.org/10.2174/157018082066230330105308>
13. Kumar, N., & Goel, N. (2022). Heterocyclic compounds: Importance in anticancer drug discovery. *Anticancer Agents in Medicinal Chemistry*, 22<, 3196–3207. [10.2174/1871520622666220404082648](https://doi.org/10.2174/1871520622666220404082648)
14. Liu, D., Luo, L., Wang, Z., Ma, X., & Gan, X. (2022). Design, synthesis and antifungal/nematicidal activity of novel 1,2,4-oxadiazole derivatives containing amide fragments. *International Journal of Molecular Sciences*, 23(3), 1596. <https://doi.org/10.3390/ijms23031596>

15. Liu, M. M., Liang, Y. R., Zhu, Z. Z., Wang, J., Cheng, X. X., Cheng, J. Y., Xu, B. P., Li, R., Liu, X. H., & Wang, Y. (2019). Discovery of novel aryl carboxamide derivatives as hypoxia-inducible factor 1 $\alpha$  signaling inhibitors with potent activities of anticancer metastasis. *Journal of Medicinal Chemistry*, 62, 9299–9314. <https://doi.org/10.1021/acs.jmedchem.9b01313>
16. Liu, X.-H., Fu, C.-H., Wang, J., Wei, Y.-C., Tan, C.-X., Weng, J.-Q., Min, L.-J., Xu, T.-M., & Wu, N. (2025). Novel 5-(trifluoromethyl)-1,2,4-oxadiazole-based pyrimidin-4-ether histone deacetylase inhibitors for controlling rust disease: Design, synthesis, activity, and structure–activity relationship. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 73(8), 4563–4573. <https://doi.org/10.1021/acs.jafc.4c09039>
17. Lahm, G. P., Desaeger, J., Smith, B. K., Pahutski, T. F., Rivera, M. A., Meloro, T., Kucharczyk, R., Lett, R. M., Daly, A., Smith, B. T., Cordova, D., Thoden, T., & Wiles, J. A. (2017). The discovery of fluazaindolizine: A new product for the control of plant parasitic nematodes. *Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters*, 27(7), 1572–1575. <https://doi.org/10.1016/j.bmcl.2017.02.029>
18. Miles, T. D., Miles, L. A., Fairchild, K. L., & Wharton, P. S. (2014). Screening and characterization of resistance to succinate dehydrogenase inhibitors in *Alternaria solani*. *Plant Pathology*, 63(1), 155–164. <https://doi.org/10.1111/ppa.12077>
19. Miyamoto, T., Hayashi, K., Okada, R., Wari, D., & Ogawara, T. (2020). Resistance to succinate dehydrogenase inhibitors in field isolates of *Podosphaera xanthii* on cucumber: Monitoring, cross-resistance patterns and molecular characterization. *Pesticide Biochemistry and Physiology*, 169, 104646. <https://doi.org/10.1016/j.pestbp.2020.104646>
20. Ou, Y., Guo, X., Zhang, Q., Zhang, W., & Gan, X. (2025). Design, synthesis, and nematocidal activity of novel 1,2,4-oxadiazole derivatives containing amide fragments. *Molecular Diversity*, 29, 2293–2304. <https://doi.org/10.1007/s11030-024-10992-9>
21. Schleker, A. S. S., Rist, M., Matera, C., Damijonaitis, A., Collienne, U., Matsuoka, K., Habash, S. S., Twelker, K., Gutbrod, O., Grundler, F. M. W., et al. (2022). Mode of action of fluopyram in plant-parasitic nematodes. *Scientific Reports*, 12(1), 11954. <https://doi.org/10.1038/s41598-022-15782-7>
22. Sun, F., Huo, X., Zhai, Y., Wang, A., Xu, J., Su, D., Bartlam, M., & Rao, Z. (2005). Crystal structure of mitochondrial respiratory membrane protein complex II. *Cell*, 121, 1043–1057. <https://doi.org/10.1016/j.cell.2005.05.025>
23. Thompson, H., Peris-Felipo, F. J., Peranginangin, N., Pocock, M., & Gayan-Quijano, A. L. (2024). Cyclobutrifluram (TYMIRIUM® technology): Low risks of a soil applied nematicide and fungicide to non-target soil invertebrates and bees. *Crop Protection*, 184, 106822. <https://doi.org/10.1016/j.cropro.2024.106822>
24. Wang, M. L., Du, Y., Ling, C., Yang, Z. K., Jiang, B. B., Duan, H. X., An, X., Li, X. H., & Yang, X. L. (2021). Design, synthesis and antifungal/anti-oomycete activity of pyrazolyl oxime ethers as novel potential succinate dehydrogenase inhibitors. *Pest Management Science*, 77, 3910–3920. <https://doi.org/10.1002/ps.6418>
25. Wang, Y., Song, H., Wang, S., Cai, Q., & Chen, J. (2024). Design, synthesis, nematocidal activity, and mechanism of novel amide derivatives containing an 1,2,4-oxadiazole moiety. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 72(1), 128–139. <https://doi.org/10.1021/acs.jafc.3c04945>
26. Xie, J. L., Yang, F., Wang, Y. P., Peng, Y. L., & Ji, H. L. (2019). Studies on the efficiency of different inoculation methods of rice white-tip nematode, *Aphelenchoides besseyi*. *Nematology*, 21, 673–678. <https://doi.org/10.1163/15685411-00003244>
27. Yan, Z., Liu, A., Huang, M., Liu, M., Pei, H., Huang, L., Yi, H. B., Liu, W. D., & Hu, A. X. (2018). Design, synthesis, DFT study and antifungal activity of the derivatives of pyrazolecarboxamide containing thiazole or oxazole ring. *European Journal of Medicinal Chemistry*, 149, 170–181. <https://doi.org/10.1016/j.ejmech.2018.02.036>
28. Yu, L., Yang, K., Yao, L., Wang, N., Kang, H., Yao, G., Li, X., & Qin, B. (2025). Synthesis and antifungal activity of 1,2,4-oxadiazole derivatives. *Molecules*, 30(8), 1851. <https://doi.org/10.3390/molecules30081851>
29. Zhao, L., Wang, B., Zhang, Y., Zhang, C., Liu, M., Chen, A., et al. (2024). Design, synthesis, nematocidal, and fungicidal activities of novel azo and azoxy compounds. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 72(10), 2473–2481. <https://doi.org/10.1021/acs.jafc.4c00000>
30. Zhong L., Wu, C., Li, M., Wu, J., Chen, Y., Ju, Z., & Tan, C. (2023). 1,2,4-Oxadiazole as a potential scaffold in agrochemistry: A review. *Organic & Biomolecular Chemistry*, 21(37), 7511–7524. <https://doi.org/10.1039/D3OB00934C>
31. Zhu, M., Du, T., Zhang, Y., Chen, W., Zhu, Z., Lu, S., & Chen, J. (2025). Novel amide derivatives containing an 1,2,4-oxadiazole moiety as potential SDH inhibitors: Design, synthesis, and nematocidal activity. *Pest Management Science*, 81(9), 5234–5249. <https://doi.org/10.1002/ps.8878>

Стаття надійшла: 23.11.2025

Прийнято: 10.12.2025

Опубліковано: 30.12.2025

## ЕКОЛОГІЯ

UDC 574:004.8

DOI <https://doi.org/10.32782/pcsd-2025-4-10>

### **Oleksiy KOZLOV**

*Doctor of Technical Sciences, Professor, Professor at the Department of Intelligent Information Systems, Petro Mohyla Black Sea National University, 10 68 Desantnykiv str., Mykolaiv, Ukraine, 54003*

**ORCID:** 0000-0003-2069-5578

**Scopus Author ID:** 7003797995

### **Anna ALEKSIEIEVA**

*Candidate in Technical Sciences, Associate Professor at the Department of Ecology, Petro Mohyla Black Sea National University, 10 68 Desantnykiv str., Mykolaiv, Ukraine, 54003*

**ORCID:** 0000-0003-0345-8538

**Scopus Author ID:** 57640508100

### **Lyudmila HRYHORIEVA**

*Doctor of Biological Sciences, Professor, Head of the Department of Ecology, Petro Mohyla Black Sea National University, 10 68 Desantnykiv str., Mykolaiv, Ukraine, 54003*

**ORCID:** 0000-0001-9452-2982

**Scopus Author ID:** 49963633100

### **Alona BILOKON**

*Candidate of Historical Sciences, GCIP Regional Acceleration Center for Innovation, Technology, and Start-Ups in Mykolaiv Region of Ukraine, 10 68 Desantnykiv str., Mykolaiv, Ukraine*

**ORCID:** 0000-0003-1644-4397

**To cite this article:** Kozlov, O., Aleksieieva, A., Hryhorieva, L., Bilokon, A. (2025). Audyt ekolohichnoi bezpeky v umovakh nadzvychnykh sytuatsii na osnovi tekhnolohii shtuchnoho intelektu ta internetu rechei [Environmental safety audit in conditions of emergency situations based on artificial intelligence and internet of things technologies]. *Problems of Chemistry and Sustainable Development*, 4, 79–89, doi: <https://doi.org/10.32782/pcsd-2025-4-10>

## ENVIRONMENTAL SAFETY AUDIT IN CONDITIONS OF EMERGENCY SITUATIONS BASED ON ARTIFICIAL INTELLIGENCE AND INTERNET OF THINGS TECHNOLOGIES

*Ensuring environmental safety under increasing anthropogenic and natural threats requires highly reliable digital systems capable of continuous monitoring, rapid diagnostics, and timely response to hazardous deviations. The integration of Artificial Intelligence (AI) and Internet of Things (IoT) technologies is becoming a key direction for strengthening the analytical capacity and operational efficiency of environmental safety audit, particularly in emergency scenarios where data volumes, uncertainty, and dynamics significantly intensify. This study provides a systematic examination of contemporary AI and IoT solutions, focusing on their functional properties, constraints, and applicability to enterprise-level environmental assessment. Special attention is given to the specific operational requirements and challenges associated with emergency conditions, where the reliability, adaptability, and automation of decision-making mechanisms are critical. Based on the conducted analysis, a generalized architecture of an integrated environmental safety audit system is proposed. The architecture incorporates a distributed IoT sensor layer for high-resolution data acquisition, intelligent AI-based modules for state evaluation and anomaly detection, and adaptive operational modes ensuring stable system*

*functionality during transitions from normal to emergency states. The proposed framework is characterized by structural flexibility, scalability, and applicability across diverse industrial domains, enabling improved situational awareness and more accurate environmental risk assessment. The results obtained substantiate the effectiveness of combining AI and IoT for strengthening technological resilience and enhancing the precision of environmental safety audit. The proposed architecture forms a methodological foundation for further research aimed at expanding system autonomy, improving predictive capabilities, and increasing robustness under complex and rapidly evolving risk conditions.*

**Keywords:** *environmental safety audit, artificial intelligence, Internet of Things, emergency scenarios, industrial monitoring, intelligent decision support, integrated system architecture.*

**Олексій КОЗЛОВ**

*доктор технічних наук, професор, професор кафедри інтелектуальних інформаційних систем, Чорноморський національний університет імені Петра Могили, вул. 68 Десантників, 10, м. Миколаїв, Україна, 54003*

**ORCID:** 0000-0003-2069-5578

**Scopus Author ID:** 7003797995

**Анна АЛЕКСЄЄВА**

*кандидат технічних наук, доцент кафедри екології, Чорноморський національний університет імені Петра Могили, вул. 68 Десантників, 10, м. Миколаїв, Україна, 54003*

**ORCID:** 0000-0003-0345-8538

**Scopus Author ID:** 57640508100

**Людмила ГРИГОР'ЄВА**

*доктор біологічних наук, професор, завідувач кафедри екології, Чорноморський національний університет імені Петра Могили, вул. 68 Десантників, 10, м. Миколаїв, Україна, 54003*

**ORCID:** 0000-0001-9452-2982

**Scopus Author ID:** 49963633100

**Альона БІЛОКОНЬ**

*кандидат історичних наук, Регіональний акселераційний центр GCIP для інновацій, технологій та інноваційних стартапів у Миколаївській області, вул. 68 Десантників, 10, м. Миколаїв, Україна, 54003*

**ORCID:** 0000-0003-1644-4397

**Бібліографічний опис статті:** Козлов, О., Алексєєва, А., Григор'єва, Л., Білоконь, А. (2025). Аудит екологічної безпеки в умовах надзвичайних ситуацій на основі технологій штучного інтелекту та інтернету речей. *Проблеми хімії та сталого розвитку*, 4, 79–89, doi: <https://doi.org/10.32782/pcsd-2025-4-10>

## **АУДИТ ЕКОЛОГІЧНОЇ БЕЗПЕКИ В УМОВАХ НАДЗВИЧАЙНИХ СИТУАЦІЙ НА ОСНОВІ ТЕХНОЛОГІЙ ШТУЧНОГО ІНТЕЛЕКТУ ТА ІНТЕРНЕТУ РЕЧЕЙ**

*Забезпечення екологічної безпеки в умовах зростаючих антропогенних та природних загроз вимагає високонадійних цифрових систем, здатних виконувати неперервний моніторинг, швидку діагностику та своєчасне реагування на небезпечні відхилення. Інтеграція технологій штучного інтелекту (ШІ) та Інтернету речей (IoT) стає ключовим напрямком для посилення аналітичних можливостей та операційної ефективності аудиту екологічної безпеки, особливо в надзвичайних ситуаціях, коли обсяги даних, невизначеність та динаміка значно зростають. У даному дослідженні представлено систематичний огляд сучасних рішень ШІ та Інтернету речей, зосереджуючись на їх функціональних властивостях, обмеженнях та застосовності до оцінки екологічної безпеки на рівні підприємства. Особлива увага приділяється конкретним операційним вимогам та викликам, пов'язаним з надзвичайними умовами, де надійність, адаптивність та автоматизація механізмів прийняття рішень є критично важливими. На основі проведеного аналізу запропоновано узагальнену архітектуру інтегрованої системи аудиту екологічної безпеки. Архітектура включає розподілений сенсорний шар IoT для збору даних з високою роздільною здатністю, інтелектуальні модулі на основі ШІ для оцінки стану та виявлення аномалій, а також адаптивні режими роботи, що забезпечують стабільну функціональність системи під час переходів від нормального до*

надзвичайного стану. Запропонована система характеризується структурною гнучкістю, масштабованістю та застосовністю в різних промислових сферах, що дозволяє покращити ситуаційну обізнаність та точність оцінки екологічних ризиків. Отримані результати підтверджують ефективність поєднання штучного інтелекту та Інтернету речей для посилення технологічної стійкості та підвищення точності аудиту екологічної безпеки. Запропонована архітектура формує методологічну основу для подальших досліджень, спрямованих на розширення автономності системи, покращення прогностичних можливостей та підвищення стійкості у складних та швидкозмінних умовах ризику.

**Ключові слова:** аудит екологічної безпеки, штучний інтелект, Інтернет речей, сценарії надзвичайних ситуацій, промисловий моніторинг, інтелектуальна підтримка рішень, інтегрована системна архітектура.

**Introduction.** Environmental safety has become a critical component of sustainable industrial development, particularly in sectors where hazardous materials, high-energy processes, or complex technological infrastructures pose elevated ecological and human health risks (Mazzi, 2023). Ensuring compliance with environmental regulations is no longer sufficient, as the enterprises must maintain continuous oversight of potential environmental hazards to prevent large-scale contamination and ecosystem degradation. The relevance of environmental safety audits is especially pronounced under conditions of technological accidents or emergency situations, where the speed and accuracy of environmental assessment directly influence the scale of damages, recovery time, and risks to surrounding communities (Hao et al., 2022). As global industrial systems become increasingly interconnected and resource-intensive, the demand for robust methodological frameworks capable of ensuring environmental resilience has significantly intensified.

Traditional approaches to environmental safety auditing rely on periodic inspections, manual data collection, static monitoring systems, and standardized checklists aimed at evaluating compliance with environmentally significant operational parameters (Huang et al., 2021). In the context of emergency risk identification, these methods typically involve expert-driven hazard analysis, fault-tree assessments, and instrument-based control of critical indicators such as pollutant emissions, effluent composition, and process deviations. Although these techniques provide a foundational basis for environmental oversight, their effectiveness is constrained by temporal latency, limited adaptability to rapidly evolving operational conditions, and incomplete visibility into complex multi-factor interactions that often precede emergency events. Consequently, conventional audit procedures may fail to detect weak signals of system instability or emerging

threats before they escalate into full-scale environmental emergencies.

In recent years, the integration of advanced digital technologies, particularly Artificial Intelligence and Internet of Things architectures, has emerged as a transformative direction for enhancing environmental auditing processes (Olawade et al., 2024). IoT-enabled sensor networks offer high-resolution, real-time measurements of environmental and technological parameters, while AI-driven analytical systems enable early detection of anomalies, predictive assessment of emergency scenarios, and automated interpretation of large-scale heterogeneous datasets. These technologies introduce fundamentally new capabilities, including continuous monitoring, adaptive thresholding, intelligent classification of hazardous states, and generation of data-driven insights that were previously unattainable through classical auditing approaches. Their adoption not only improves audit accuracy and operational speed but also enhances the resilience and responsiveness of enterprise-level environmental management systems.

Given the increasing complexity of industrial operations and the rising frequency of technological incidents worldwide, the development of comprehensive models, advanced methodological frameworks, and integrated technological solutions for environmental safety auditing has become an urgent research priority. Achieving effective and efficient auditing in emergency-prone environments requires the rational combination of IoT-based sensing infrastructures, AI-enabled decision-support mechanisms, and intelligent data-processing architectures capable of functioning under dynamic and uncertain conditions. Therefore, this study focuses on conceptualizing and substantiating modern approaches for the synergistic use of emerging digital technologies in environmental safety auditing, with special emphasis on their application within emergency

situations, where rapid situational awareness and intelligent response strategies are essential.

#### **Analysis of recent research and publications.**

In recent years, the academic community has developed a substantial variety of methods and solutions for monitoring and auditing environmental safety across different industrial sites. Traditional approaches include periodic environmental inspections, fixed point sampling, manual audits, and laboratory analyses of emissions and effluents (Chun et al., 2020). For example, classical environmental auditing on industrial plants often involves gas chromatography to analyze pollutant concentration in stacks, as well as chemical analysis of wastewater to assess compliance with discharge limits (Moretti et al., 2020). These conventional practices remain the backbone of regulatory compliance and provide robust baseline data for environmental performance.

More recently, research has increasingly converged on the integration of Artificial Intelligence and Internet of Things technologies for environmental monitoring and auditing. AI-driven techniques, such as machine learning and deep learning, enable automated anomaly detection, predictive forecasting, and classification of environmental states, while IoT sensor networks facilitate real-time acquisition of heterogeneous environmental parameters (e.g., gas concentrations, temperature, humidity). For instance, there are frameworks that embed edge-AI within IoT nodes to enable on-device inference and energy-efficient continuous monitoring (Wiese et al., 2025, Miller et al., 2025, Rahman et al., 2024). Other work demonstrates how AI-IoT systems can detect greenhouse gas emissions in real time, applying predictive analytics for emissions surveillance (Yavari et al., 2023). In parallel, IoT/AI has been employed for the early detection of environmental emergencies: anomaly detection models based on time-series data from sensors have been used to flag potential leakages or hazardous discharges before they escalate (Bajwa, 2025).

Despite these advances, most of existing solutions remain isolated in their operation: AI-based analytics systems are developed separately from IoT networks, or IoT deployments lack integrated decision support for emergencies. Consequently, the full potential of jointly using AI and IoT in environmental safety auditing, especially under emergency conditions, remains underexploited.

**The main aim of this work** is to analyze the specific features of AI and IoT technologies and propose a generalized, synergistic framework for their integrated application in enterprise-level environmental safety audits under emergency scenarios.

#### **Presentation of the main research material.**

The present section provides a systematic exposition of the proposed conceptual approach to enhancing environmental safety audit processes under both normal operational conditions and emergency scenarios. The analysis focuses on the integration of artificial intelligence methodologies, including neural-network-based models and fuzzy-logic systems, into IoT-enabled monitoring infrastructures deployed at industrial enterprises. Particular attention is given to the differentiation between routine audit procedures and emergency-mode assessment, as well as to mechanisms enabling the intelligent transition between these modes.

*AI technologies.* Artificial intelligence has become an essential analytical tool in modern environmental monitoring due to its capacity to identify complex patterns, infer hidden relationships among multivariate ecological parameters, and support early detection of hazardous conditions (Alotaibi, & Nassif, 2024). Machine-learning algorithms are increasingly applied for forecasting pollutant concentrations, anomaly detection in technological systems, and predictive risk estimation for industrial accidents (Argyroudis et al., 2022). When integrated with sensor-rich IoT infrastructures, AI enables continuous, high-resolution assessment of environmental conditions, providing decision-makers with timely insights into ecological risks and process deviations.

Neural-network methods represent one of the most effective computational paradigms for environmental audit tasks owing to their ability to approximate nonlinear dependencies and learn from large, heterogeneous datasets (Haeri Boroujeni et al., 2024). Convolutional neural networks can be employed for processing image-based environmental data, such as gas-leak visualization or aerial ecological inspections, whereas recurrent and long short-term memory networks are well-suited for analyzing temporal sequences of pollutant concentrations, pressure fluctuations, or emission dynamics. Their application ensures high accuracy in predicting critical environmental indicators, identifying precursor signatures of

accidents, and supporting intelligent classification of operational states.

Fuzzy-logic systems, in contrast, provide an interpretable reasoning framework particularly relevant for industrial ecological audits where expert knowledge, linguistic rules, and uncertain measurements must be combined (Congxiang et al., 2024). Fuzzy controllers enable flexible evaluation of environmental conditions based on approximate thresholds, smooth decision boundaries, and adaptive membership functions (Zheng et al., 2025). This makes them especially valuable for scenarios where sensor readings exhibit noise, abrupt fluctuations, or partial incompleteness. Moreover, fuzzy-logic approaches are advantageous in the classification of early emergency indicators, such as borderline pollutant concentrations, irregular pressure gradients, or rapid pH drifts, when rigid deterministic thresholds may lead to false alarms.

*Features of environmental safety audit in standard operating modes and in emergency situations.* In standard operational mode, the environmental safety audit focuses on systematic assessment of baseline technological processes, verifying compliance with environmental standards, and evaluating trends in key ecological parameters. AI-enhanced audit tools support automated detection of slow-evolving deviations, optimization of filtration or purification cycles, and continuous benchmarking of environmental performance indicators. The system operates with stable thresholds, predictable pollutant emission patterns, and routine verification of the operational state of gas treatment units, wastewater systems, and emission control infrastructure.

Transition into emergency-assessment mode is triggered when the AI-driven decision module detects signatures indicative of a potentially hazardous event. These signatures may include rapid changes in pollutant concentration, abnormal sensor correlation patterns, pressure spikes exceeding model-based predictions, or simultaneous deviations across multiple environmental variables. Neural-network anomaly detectors and fuzzy-rule evaluators may operate separately or in parallel to compute a confidence score reflecting the likelihood of an emergency. When this score surpasses a predefined threshold, the system switches into emergency mode, initiating high-frequency monitoring, activating additional diagnostic routines, and issuing alerts to responsible personnel.

The emergency-mode audit differs fundamentally from routine environmental assessment, as its primary objectives include real-time localization of the hazard source, quantification of immediate ecological risks, and support of rapid operational decision-making. In this mode, AI algorithms prioritize rapid inference over long-term accuracy, enabling the identification of leak intensities, propagation trajectories, and potential environmental impact zones. Fuzzy-logic systems provide interpretable, rule-based reasoning for urgent decision support, while neural-network models assist in predictive estimation of accident escalation dynamics. Together, these technologies facilitate a coordinated, intelligent response to industrial emergencies, ensuring minimal environmental impact and enhanced operational safety.

*IoT technologies.* The application of Internet of Things technologies plays a foundational role in enabling continuous, high-resolution environmental auditing at industrial enterprises. IoT architectures provide the physical sensing and communication infrastructure upon which modern analytics can operate (Taneja et al., 2024). Distributed networks of smart sensors deployed across critical technological zones allow the system to measure pollutant concentrations, equipment parameters, and environmental conditions with fine temporal granularity. These sensors, equipped with built-in microcontrollers, support preliminary data pre-processing, calibration, and anomaly filtering at the edge, thereby reducing communication overhead and improving the reliability of downstream analytical modules (Maksimov et al., 2025). The resulting sensor ecosystem forms a dense information field that captures both routine operational variations and the earliest manifestations of environmentally hazardous events.

A central advantage of IoT-based monitoring lies in its capability to support real-time data transmission through heterogeneous communication protocols, including LoRaWAN, NB-IoT, Wi-Fi, and industrial Ethernet (Taneja et al., 2024). Such flexibility ensures robust connectivity even under dynamically changing industrial conditions or partial infrastructure failures. Continuous data flow enables analytical models to maintain up-to-date situational awareness and compute predictive indicators of potential emergencies. Furthermore, IoT devices facilitate

decentralized data acquisition by integrating multisensory modalities, such as gas concentration meters, pressure transducers, vibration sensors, thermal cameras, and chemical analyzers, into a unified audit framework (Fan et al., 2024). This multimodal integration significantly improves the completeness and accuracy of environmental assessments, allowing the system to detect weakly expressed or composite anomalies that cannot be identified through isolated measurements.

Another important aspect is the interoperability and scalability of IoT infrastructures within enterprise-level environmental audit systems. Modern IoT platforms support standardized data formats, cloud-based storage, and secure communication channels, enabling seamless integration of new sensors, additional monitoring zones, or specialized emergency-detection devices without substantial system redesign. This flexibility is essential for enterprises with evolving production processes or variable environmental risks. Moreover, IoT-driven systems support automated response mechanisms, such as activation of local ventilation, isolation of hazardous zones, or initiation of emergency diagnostics, thereby forming a cyber-physical foundation for intelligent environmental protection.

*Integration of AI and IoT technologies.* The joint integration of IoT infrastructures with advanced AI methodologies creates a synergistic technological ecosystem that substantially enhances the efficiency, responsiveness, and predictive capabilities of environmental safety audit systems. IoT networks serve as the primary data supply layer, generating continuous, high-resolution streams of multisensory measurements that describe both the operational state of industrial equipment and the surrounding environmental conditions (Popescu et al., 2024). Artificial intelligence algorithms, ranging from deep neural networks to adaptive fuzzy-logic systems, operate as the analytical core, transforming heterogeneous sensor data into actionable insights, early-warning indicators, and context-aware decision recommendations. When combined, these technologies overcome the inherent limitations of traditional audit approaches by enabling dynamic, real-time interpretation of complex environmental variables, detecting subtle precursors of hazardous events, and providing reliable assessments even under uncertainty or incomplete information.

The synergy between IoT and AI also supports the construction of hierarchical, self-optimizing monitoring architectures, where local edge-devices conduct preliminary anomaly filtering and AI-powered cloud servers perform high-level pattern recognition and risk forecasting (Kozlov et al., 2024). Such integrated systems not only increase audit accuracy and operational continuity but also facilitate predictive maintenance, automated emergency diagnostics, and intelligent mitigation strategies. Ultimately, the coordinated use of IoT and AI establishes a transformative paradigm for ecological safety audits, shifting them from periodic, reactive procedures to intelligent, continuous, and anticipatory environmental risk management frameworks.

*Generalized architecture of the environmental safety audit system in emergency situations.* Having analyzed the advantages of AI and IoT technologies, the specific characteristics of their application in environmental safety auditing, as well as the prospects for their combined use we now proceed to formulate a generalized architecture of an environmental audit system designed to operate effectively under emergency conditions.

The generalized architecture of this system, proposed by the authors, is illustrated in Fig. 1, where the corresponding notation is provided:  $X_S$  – vector of physical quantities that need to be monitored in the process of environmental audit;  $U_S$  – vector of output signals of sensors of the integrated sensor system;  $U_{SP}$  – vector of processed signals coming from the local level of environmental safety audit and control;  $U_{OS<}$  – vector of signals characterizing the state of the system (normal or emergency).

The operation of the proposed generalized environmental safety audit system is organized as a multi-layered framework in which the integrated sensory infrastructure provides the foundational data for both routine and emergency-mode assessments. At the enterprise level, a heterogeneous network of sensors is deployed across technological equipment, engineering structures, and environmentally sensitive zones to monitor the operational integrity of machinery as well as the state of the surrounding industrial environment.

These sensors capture a wide range of critical parameters, including gaseous emissions, temperature, pressure, vibration, chemical composition of water and air, and structural

stability indicators, thus forming a comprehensive and continuously updated picture of environmental safety conditions. To support the acquisition and pre-processing of this information, the local audit and ecological control layer incorporates data acquisition modules, local operator stations, communication units, and an alerting subsystem capable of issuing immediate warnings in response to abnormal readings. At predefined time intervals, aggregated data packets are processed locally and then transmitted via the Internet to a remote upper-level audit and monitoring center.

The upper-level subsystem hosts a human-machine interface designed to provide intuitive, high-clarity access for the chief operator and incorporates intelligent analytical modules deployed on a high-performance server infrastructure. The human-machine interface may be accessed from desktop platforms or from a variety of mobile devices equipped with Internet connectivity, thereby ensuring operational flexibility and continuous remote supervision.

Through this interface, the operator can monitor all environmentally significant process

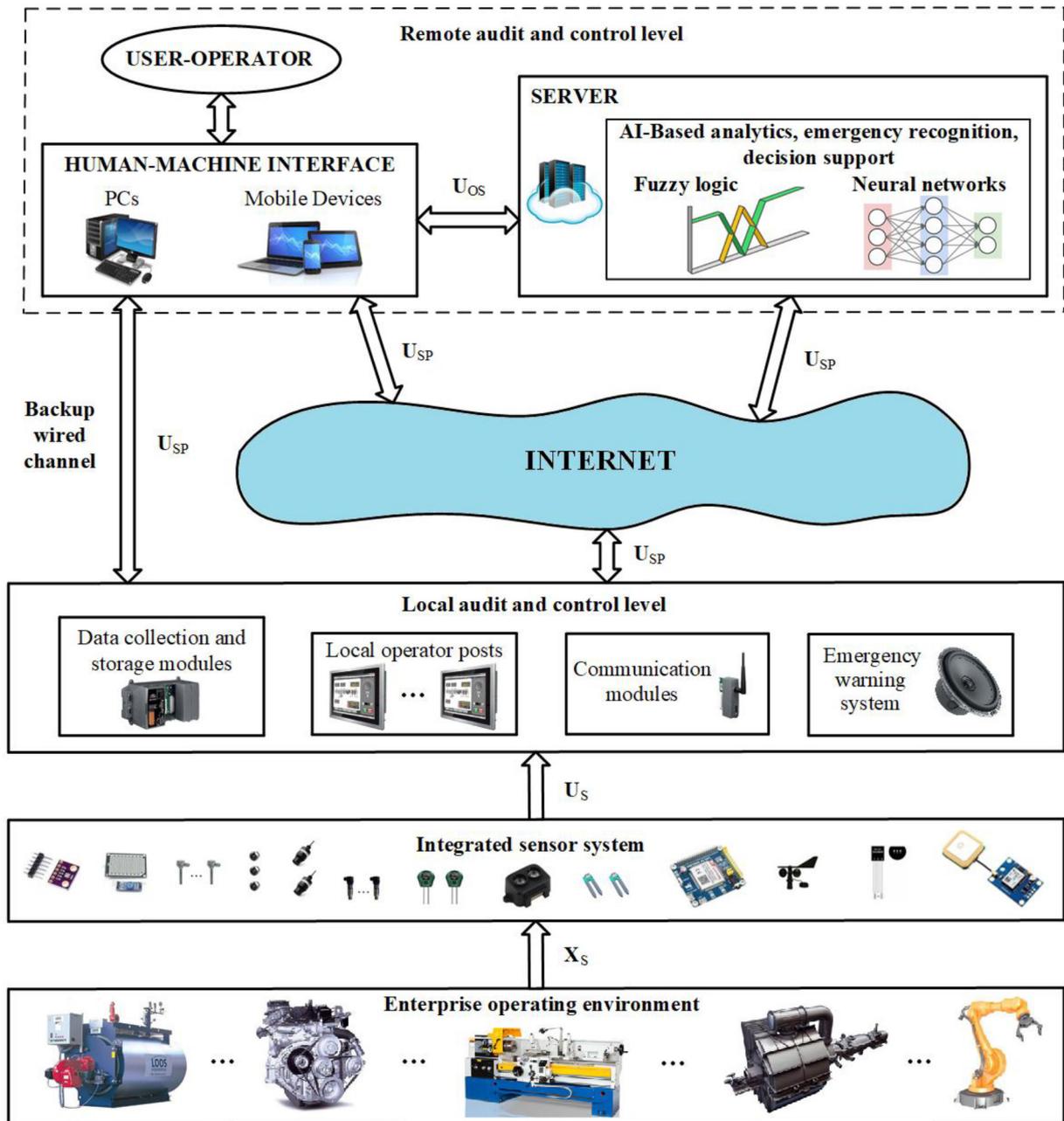


Fig. 1. Generalized functional structure of the environmental safety audit system in emergency situations based on AI and IoT technologies

variables  $X_S$  and receive analytical feedback  $U_{OS}$  generated by server-side AI modules. These intelligent modules may be implemented using artificial neural networks, trained beforehand on representative datasets containing both normal and emergency-state patterns, or using fuzzy-logic models configured on the basis of expert-derived rule sets. Their functions include the recognition of hazardous conditions and emergency onset, assessment of threat severity and spatial distribution, and the generation of decision-support recommendations for effective and timely response. Based on these insights, the operator is able to make informed managerial decisions that align with the nature, intensity, and dynamics of the detected emergency situation.

To ensure robust functioning even under adverse communication conditions, the system incorporates multiple layers of redundancy. All sensor data are mirrored to local operator stations, enabling autonomous emergency detection and alert activation if connectivity with the remote server is lost. A dedicated autonomous alarm subsystem initiates warning signals automatically when critical thresholds are exceeded, ensuring rapid response independent of network status. In addition to the primary Internet communication channel, the architecture includes an industrial wired backup link, designed to maintain data transmission capabilities in cases of wireless network failure, physical damage to communication modules, or cyber-induced disruptions. Optional short-range radio communication protocols and edge-level AI models can also be integrated to support decentralized emergency diagnostics when both primary and backup communication channels are compromised. Collectively, these features create a resilient and fault-tolerant environmental audit system capable of maintaining operational continuity and high analytical reliability even in the challenging conditions associated with industrial emergencies.

*Standard and emergency operating modes of the proposed system.* In its standard operating mode, the system functions as a continuous environmental audit and monitoring platform, maintaining steady-state observation of all critical technological and ecological parameters. Measurements are collected at nominal sampling frequencies sufficient for routine diagnostics, compliance verification, and early detection

of slow-developing anomalies. Under these conditions, AI-based analytical modules perform low-intensity background assessments, focusing on trend analysis, gradual deviations from normal operating ranges, and detection of early precursors to potential hazards. The goal of this regime is to maintain environmental safety, ensure regulatory conformity, and create a comprehensive historical dataset for subsequent predictive modeling. The local subsystems operate with moderate computational load, and communications are optimized to reduce bandwidth usage while still ensuring timely updates to the remote monitoring level. In this mode, the system behaves as a stable supervisory audit mechanism without unnecessary activation of high-intensity analytical computations or emergency-response protocols.

The transition to the emergency mode is initiated at the moment when the intelligent recognition module detects a combination of sensor signals that correspond to patterns of hazardous states or emerging incidents. Depending on the analytical model in use, this detection may be triggered by neural-network classifiers identifying high-confidence anomaly signatures or by fuzzy-logic inference systems evaluating complex rule sets that describe unsafe parameter combinations. Once the threshold for emergency recognition is exceeded, the system automatically escalates into a high-frequency monitoring state. In this mode, the sampling rates for key sensors, such as those measuring toxic gas concentrations, temperature gradients, pressure surges, or structural vibration, are increased substantially to capture rapid parameter fluctuations typical of emergency dynamics. Additional measurement devices, including portable gas analyzers, mobile robotic platforms, or supplementary thermal sensors, may also be activated to enhance spatial coverage and measurement precision.

During this transition, communication protocols switch to prioritized data streaming, ensuring that the most critical measurements are transmitted with minimal latency to the upper-level monitoring center. The decision-support subsystem concurrently raises its computational intensity, executing rapid predictive assessments, hazard propagation modeling, and real-time risk categorization. At the same time, the system activates specialized alert channels, including local sirens, operator notifications, and emergency messaging

to responsible personnel. This emergency-state regime remains active until the system's analytical modules determine that all monitored parameters have returned to stable, safe ranges for a defined period. After stabilization, the system performs a controlled downgrade to the routine auditing mode, while retaining all emergency-related data for further examination, reporting, and improvement of the training datasets or fuzzy-rule bases. Such dual-regime functionality ensures both operational efficiency in normal conditions and rapid, intelligent responsiveness during emergencies, significantly enhancing the overall resilience and effectiveness of environmental safety audit processes.

*Limitations and directions for further research.*

Although the proposed system offers significant advantages for automated environmental safety auditing, it still faces several limitations. First, its overall performance remains highly dependent on the reliability and long-term stability of sensor measurements: drift, fouling, or partial damage of sensors in harsh industrial environments may reduce accuracy and lead to incorrect detection outcomes. Second, AI-based analytical modules require sufficiently large and representative datasets to ensure robust recognition of emergency conditions; however, real-world emergency data are typically scarce, which limits the generalization ability of neural networks and reduces the completeness of expert-defined fuzzy rule sets.

Future research will therefore focus on overcoming these constraints. One promising direction involves developing self-diagnosing and auto-calibrating sensor modules capable of maintaining measurement accuracy under varying operational conditions. Another direction is the synthesis of hybrid analytical models that combine neural networks, fuzzy logic, and synthetic data generation (including simulation-based digital twins) to improve emergency-state recognition even when real datasets are limited. Such developments will enhance the adaptability, robustness, and reliability of next-generation environmental audit systems.

**Conclusions.** In this work, the stated aim has been achieved by conducting a detailed analysis of the specific features of AI and IoT technologies and by formulating a generalized synergistic framework for their integrated use in enterprise-level environmental safety audits under emergency conditions. The study examined the operational principles, advantages, and constraints of these technologies and outlined their complementary roles in enhancing monitoring accuracy, decision support, and emergency response capabilities.

A focused evaluation of AI techniques, including neural networks and fuzzy-logic models, revealed their strong potential for anomaly detection, predictive assessment, and intelligent decision-making in both routine and emergency audit modes. Likewise, the analysis of IoT infrastructures demonstrated their critical function as the foundational sensing and communication layer, enabling high-resolution data acquisition, real-time information exchange, and continuous situational awareness across industrial environments. The proposed system's generalized architecture, integrating AI-driven analytical modules with an IoT-based sensory network and multi-level control interface, provides a highly effective and universal solution suitable for diverse industrial domains. Its scalability, resilience, and operational adaptability make it appropriate for enterprises with varying technological complexity and environmental risk profiles. Future work will focus on refining sensor reliability, expanding hybrid AI models, and developing advanced simulation tools to further enhance the robustness and predictive capabilities of next-generation environmental audit systems.

Future research will focus on strengthening the system's analytical reliability and operational resilience, particularly through improved data integration mechanisms and more adaptive intelligent models capable of functioning under diverse emergency conditions. It is also planned to consider several specific examples of the application of this system in enterprises.

#### BIBLIOGRAPHY:

1. Mazzi A. Environmental and safety risk assessment for sustainable circular production: Case study in plastic processing for fashion products. *Heliyon*, 2023. Vol. 9, Iss. 11, e21352. <https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2023.e21352>
2. Hao Y. et al. The inducing factors of environmental emergencies: Do environmental decentralization and regional corruption matter? *Journal of Environmental Management*. 2022. Vol. 302, Part B, 114098. <https://doi.org/10.1016/j.jenvman.2021.114098>
3. Huang D., Wang S., Liu Z. A systematic review of prediction methods for emergency management. *International Journal of Disaster Risk Reduction*. 2021. Vol. 62, 102412. <https://doi.org/10.1016/j.ijdr.2021.102412>

4. Olawade D. B. et al. Artificial intelligence in environmental monitoring: Advancements, challenges, and future directions. *Hygiene and Environmental Health Advances*. 2024. Vol. 12, 100114. <https://doi.org/10.1016/j.heha.2024.100114>
5. Chun Y. et al. Temperature control on wastewater and downstream nitrous oxide emissions in an urbanized river system. *Water Research*. 2020. Vol. 187, 116417. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2020.116417>
6. Moretti A., Ivan H. L., Skvaril J. A review of the state-of-the-art wastewater quality characterization and measurement technologies. Is the shift to real-time monitoring nowadays feasible? *Journal of Water Process Engineering*. 2020. Vol. 60, 105061. <https://doi.org/10.1016/j.jwpe.2024.105061>
7. Wiese P. et al. A Multi-Modal IoT Node for Energy-Efficient Environmental Monitoring with Edge AI Processing. 2025. *arXiv preprint*, arXiv:2507.14165. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2507.14165>
8. Miller T. et al. Integrating Artificial Intelligence Agents with the Internet of Things for Enhanced Environmental Monitoring: Applications in Water Quality and Climate Data. *Electronics*. 2025. Vol. 14, No. 4, 696. <https://doi.org/10.3390/electronics14040696>
9. Rahman M. M. et al. Enhancing IoT-Based Environmental Monitoring and Power Forecasting: A Comparative Analysis of AI Models for Real-Time Applications. *Applied Sciences*. 2024. Vol. 14, No. 24, 11970. <https://doi.org/10.3390/app142411970>
10. Yavari A. et al. ArtEMon: Artificial Intelligence and Internet of Things Powered Greenhouse Gas Sensing for Real-Time Emissions Monitoring. *Sensors*. 2023. Vol. 23, No. 18, 7971. <https://doi.org/10.3390/s23187971>
11. Bajwa A. AI-based Emergency Response Systems: A Systematic Literature Review on Smart Infrastructure Safety. *American Journal of Advanced Technology and Engineering Solutions*. 2025. Vol. 1, Iss. 1, pp. 174-200. <http://dx.doi.org/10.2139/ssrn.5171521>
12. Alotaibi E., Nassif N. Artificial intelligence in environmental monitoring: in-depth analysis. *Discover Artificial Intelligence*. 2024. 4, 84. <https://doi.org/10.1007/s44163-024-00198-1>
13. Argyroudis S. A., et al. Digital technologies can enhance climate resilience of critical infrastructure. *Climate Risk Management*. 2022. Vol. 35, 100387. <https://doi.org/10.1016/j.crm.2021.100387>
14. Haeri Boroujeni S. P., et al. A comprehensive survey of research towards AI-enabled unmanned aerial systems in pre-, active-, and post-wildfire management. 2024. *arXiv preprint*, arXiv:2401.02456. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2401.02456>
15. Congxiang L., Kozlov O., Kondratenko G., Aleksieieva A. Decision support system for maintenance planning of vortex electrostatic precipitators based on IoT and AI techniques, In: Yuriy P. Kondratenko, Anatolii I. Shevchenko (Eds.) "Research Tendencies and Prospect Domains for AI Development and Implementation", River Publishers, New York, USA, 2024. pp. 87–108. <https://ieeexplore.ieee.org/document/10631858>
16. Zheng Y., Wang J., Aleksieieva A., Shynder A. Kondratenko Y. Adaptive Control of Pyrolysis Reactor's Temperature Modes Based on Fuzzy Logic and Metaheuristic Optimization. *Proceedings of the Bulgarian Academy of Sciences*. 2025. Vol. 78, no 6, pp. 884–893. <https://doi.org/10.7546/CRABS.2025.06.11>
17. Taneja H. et al. Monitoring and Mitigating Climate-Induced Natural Disasters with Cloud IoT. *Journal of Climate Change*. 2024. Vol. 10, No. 1, pp. 61-66. <https://doi.org/10.3233/JCC240008>
18. Maksimov M., et al. Design of Fault-tolerant Structures for Underwater Sensor Networks based on Markov Chains. *Journal of Automation, Mobile Robotics and Intelligent Systems*. 2025. 19(1), pp. 49-64. <https://doi.org/10.14313/jamris-2025-006>
19. Fan K., et al. Harnessing the power of AI and IoT for real-time CO<sub>2</sub> emission monitoring. 2024. *Heliyon*, 10(1), e36612. <https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2024.e36612>
20. Popescu S. M., et al. Artificial intelligence and IoT driven technologies for environmental pollution monitoring and management. *Frontiers in Environmental Science*. 2024. 12, 1336088. <https://doi.org/10.3389/fenvs.2024.1336088>
21. Kozlov O., Kondratenko Y., Skakodub O. Intelligent IoT-based Control System of the UAV for Meteorological Measurements. *Journal of Mobile Multimedia*. 2024. Vol. 20, Is. 3, pp. 555-596. <https://doi.org/10.13052/jmm1550-4646.2032>

#### REFERENCES:

1. Mazzi, A. (2023). Environmental and safety risk assessment for sustainable circular production: Case study in plastic processing for fashion products. *Heliyon*, Vol. 9, Iss. 11, e21352. <https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2023.e21352>
2. Hao, Y. et al. (2022). The inducing factors of environmental emergencies: Do environmental decentralization and regional corruption matter? *Journal of Environmental Management*, Vol. 302, Part B, 114098. <https://doi.org/10.1016/j.jenvman.2021.114098>
3. Huang, D., Wang, S., & Liu, Z. (2021). A systematic review of prediction methods for emergency management. *International Journal of Disaster Risk Reduction*, Vol. 62, 102412. <https://doi.org/10.1016/j.ijdrr.2021.102412>

4. Olawade, D. B. et al. (2024). Artificial intelligence in environmental monitoring: Advancements, challenges, and future directions. *Hygiene and Environmental Health Advances*, Vol. 12, 100114. <https://doi.org/10.1016/j.heha.2024.100114>
5. Chun, Y. et al. (2020). Temperature control on wastewater and downstream nitrous oxide emissions in an urbanized river system. *Water Research*, Vol. 187, 116417. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2020.116417>
6. Moretti, A., Ivan, H. L., & Skvaril, J. (2020). A review of the state-of-the-art wastewater quality characterization and measurement technologies. Is the shift to real-time monitoring nowadays feasible? *Journal of Water Process Engineering*, Vol. 60, 105061. <https://doi.org/10.1016/j.jwpe.2024.105061>
7. Wiese, P. et al. (2025). A Multi-Modal IoT Node for Energy-Efficient Environmental Monitoring with Edge AI Processing. *arXiv preprint*, arXiv:2507.14165. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2507.14165>
8. Miller, T. et al. (2025). Integrating Artificial Intelligence Agents with the Internet of Things for Enhanced Environmental Monitoring. *Applications in Water Quality and Climate Data. Electronics*, Vol. 14, No. 4, 696. <https://doi.org/10.3390/electronics14040696>
9. Rahman, M. M. et al. (2024). Enhancing IoT-Based Environmental Monitoring and Power Forecasting: A Comparative Analysis of AI Models for Real-Time Applications. *Applied Sciences*, Vol. 14, No. 24, 11970. <https://doi.org/10.3390/app142411970>
10. Yavari, A. et al. (2023). ArtEMon: Artificial Intelligence and Internet of Things Powered Greenhouse Gas Sensing for Real-Time Emissions Monitoring. *Sensors*, Vol. 23, No. 18, 7971. <https://doi.org/10.3390/s23187971>
11. Bajwa, A. (2025). AI-based Emergency Response Systems: A Systematic Literature Review on Smart Infrastructure Safety. *American Journal of Advanced Technology and Engineering Solutions*, Vol. 1, Iss. 1, pp. 174–200. <http://dx.doi.org/10.2139/ssrn.5171521>
12. Alotaibi, E., & Nassif, N. (2024). Artificial intelligence in environmental monitoring: in-depth analysis. *Discover Artificial Intelligence*, 4, 84. <https://doi.org/10.1007/s44163-024-00198-1>
13. Argyroudis, S. A., et al. (2022). Digital technologies can enhance climate resilience of critical infrastructure. *Climate Risk Management*, Vol. 35, 100387. <https://doi.org/10.1016/j.crm.2021.100387>
14. Haeri Boroujeni, S. P., et al. (2024). A comprehensive survey of research towards AI-enabled unmanned aerial systems in pre-, active-, and post-wildfire management. *arXiv preprint arXiv:2401.02456*. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2401.02456>
15. Congxiang, L., Kozlov, O., Kondratenko, G., & Aleksieieva, A. (2024). Decision support system for maintenance planning of vortex electrostatic precipitators based on IoT and AI techniques, In: Yuriy P. Kondratenko, Anatolii I. Shevchenko (Eds.) “Research Tendencies and Prospect Domains for AI Development and Implementation”, River Publishers, New York, USA, pp. 87–108. <https://ieeexplore.ieee.org/document/10631858>
16. Zheng, Y., Wang, J., Aleksieieva, A., Shynder, A., & Kondratenko, Y. (2025). Adaptive Control of Pyrolysis Reactor’s Temperature Modes Based on Fuzzy Logic and Metaheuristic Optimization. *Proceedings of the Bulgarian Academy of Sciences*, Vol. 78, no 6, pp. 884–893. <https://doi.org/10.7546/CRABS.2025.06.11>
17. Taneja H. et al. (2024). Monitoring and Mitigating Climate-Induced Natural Disasters with Cloud IoT. *Journal of Climate Change*, Vol. 10, No. 1, pp. 61-66. <https://doi.org/10.3233/JCC240008>
18. Maksimov, M., et al. (2025). Design of Fault-tolerant Structures for Underwater Sensor Networks based on Markov Chains. *Journal of Automation, Mobile Robotics and Intelligent Systems*, 19(1), pp. 49-64. <https://doi.org/10.14313/jamris-2025-006>
19. Fan, K., et al. (2024). Harnessing the power of AI and IoT for real-time CO<sub>2</sub> emission monitoring. *Heliyon*, 10(1), e36612. <https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2024.e36612>
20. Popescu, S. M., et al. (2024). Artificial intelligence and IoT driven technologies for environmental pollution monitoring and management. *Frontiers in Environmental Science*, 12, 1336088. <https://doi.org/10.3389/fenvs.2024.1336088>
21. Kozlov, O., Kondratenko, Y., & Skakodub, O. (2024). Intelligent IoT-based Control System of the UAV for Meteorological Measurements. *Journal of Mobile Multimedia*, Vol. 20, Is. 3, pp. 555–596. <https://doi.org/10.13052/jmm1550-4646.2032>

Стаття надійшла: 21.11.2025

Прийнято: 09.12.2025

Опубліковано: 30.12.2025

УДК 502.131.1:622.271:656.13

DOI <https://doi.org/10.32782/pcsd-2025-4-11>

**Людмила ГЕРАСИМЧУК**

кандидат сільськогосподарських наук, доцент кафедри екології та природоохоронних технологій, Державний університет «Житомирська політехніка», вул. Чуднівська, 103, м. Житомир, Україна, 10005

**ORCID:** 0000-0002-3166-5588

**Ніна КИРИЛЕНКО**

кандидат технічних наук, старший викладач кафедри екології та природоохоронних технологій, Державний університет «Житомирська політехніка», вул. Чуднівська, 103, м. Житомир, Україна, 10005

**ORCID:** 0000-0001-7222-9320

**Руслана ВАЛЕРКО**

доктор сільськогосподарських наук, професор кафедри екології та природоохоронних технологій, Державний університет «Житомирська політехніка», вул. Чуднівська, 103, м. Житомир, Україна, 10005

**ORCID:** 0000-0003-4716-0100

**Ірина ПАЦЕВА**

доктор технічних наук, професор кафедри екології та природоохоронних технологій, Державний університет «Житомирська політехніка», вул. Чуднівська, 103, м. Житомир, Україна, 10005

**ORCID:** 0000-0001-6271-7355

**Бібліографічний опис статті:** Герасимчук, Л., Кириленко, Н., Валерко, Р., Пацева, І. (2025). Інтеграція ESG-критеріїв та екологічних стандартів ЄС у системах управління кар'єрним транспортом. *Проблеми хімії та сталого розвитку*, 4, 90–97, doi: <https://doi.org/10.32782/pcsd-2025-4-11>

## ІНТЕГРАЦІЯ ESG-КРИТЕРІЇВ ТА ЕКОЛОГІЧНИХ СТАНДАРТІВ ЄС У СИСТЕМАХ УПРАВЛІННЯ КАР'ЄРНИМ ТРАНСПОРТОМ

**Метою** дослідження є визначення та обґрунтування підходів до інтеграції ESG-критеріїв, екологічних стандартів ЄС та цифрових інструментів регулювання у систему управління внутрішньокар'єрним транспортом з метою підвищення екологічної ефективності, прозорості та відповідності принципам сталого видобутку.

**Методологія.** У дослідженні застосовано комплексний підхід, що поєднує аналіз екологічних та правових стандартів ЄС, принципів ESG-комплаєнсу та цифрових інструментів екологічного регулювання. Для оцінки впливів і ефективності транспортних процесів використано моделі прогнозування витрат пального та викидів, побудовані на методах машинного навчання. Проведено сценарний аналіз екологічних та технологічних рішень, а також оцінено можливість інтеграції цифрових систем e-permitting, INSPIRE та one-stop-shop у практики екологічного управління гірничих підприємств.

**Наукова новизна** полягає у розробленні та обґрунтуванні інтегрованого підходу до управління внутрішньокар'єрними транспортними процесами, який поєднує вимоги екологічних стандартів ЄС, ESG-критерії та цифрові технології. Запропоновано модель оцінювання екологічної ефективності на основі прогнозних цифрових інструментів (ML-моделі, Digital Twin, IoT-моніторинг) та визначено можливості впровадження європейських систем e-permitting, INSPIRE і one-stop-shop у практики сталого видобутку.

**Висновки.** Проведене дослідження узагальнило підходи до інтеграції екологічних стандартів ЄС, ESG-критеріїв та цифрових технологій у систему управління внутрішньокар'єрним транспортом. Сталій видобуток вимагає поєднання правових, управлінських та цифрових інструментів, які забезпечують прозорість, екологічну ефективність і відповідальність виробництва. Стандарти ЄС (IED, EU Taxonomy, Green Deal) визначають

рамки для зменшення викидів і підвищення енергоефективності, а ESG-критерії – комплексну оцінку екологічних, соціальних та управлінських аспектів діяльності. Цифрові моделі, аналітика, IoT-моніторинг і технологія Digital Twin дають змогу точно оцінювати впливи, оптимізувати логістику та зменшувати навантаження на довкілля. Європейські інструменти регулювання (e-permitting, INSPIRE, one-stop-shop) підсилюють прозорість і сприяють гармонізації практик із правом ЄС. Синергія цих рішень формує цілісну модель сталого видобутку та підтримує інтеграцію України в європейський екологічний простір.

**Ключові слова:** ESG-комплаєнс, сталий видобуток, екологічні стандарти ЄС, EU Taxonomy, екологічне управління, цифрові технології, внутрішньокар'єрний транспорт, Digital Twin, IoT-моніторинг, e-permitting, INSPIRE, one-stop-shop, зелена трансформація, гармонізація регулювання, корпоративна відповідальність.

### **Liudmyla HERASYMCHUK**

*Candidate of Agricultural Sciences, Associate Professor at the Department of Ecology and Environmental Protection Processes, State University «Zhytomyr Polytechnic», 103 Chudnivska str., Zhytomyr, Ukraine, 10005*

**ORCID:** 0000-0002-3166-5588

### **Nina KYRYLENKO**

*Candidate of Technical Sciences, Senior Lecturer at the Department of Ecology and Environmental Protection Processes, State University «Zhytomyr Polytechnic», 103 Chudnivska str., Zhytomyr, Ukraine, 10005*

**ORCID:** 0000-0001-7222-9320

### **Ruslana VALERKO**

*Doctor of Agricultural Sciences, Professor at the Department of Ecology and Environmental Protection Processes, State University «Zhytomyr Polytechnic», 103 Chudnivska str., Zhytomyr, Ukraine, 10005*

**ORCID:** 0000-0003-4716-0100

### **Iryna PATSEVA**

*Doctor of Technical Sciences, Professor at the Department of Ecology and Environmental Protection Processes, State University «Zhytomyr Polytechnic», 103 Chudnivska str., Zhytomyr, Ukraine, 10005*

**ORCID:** 0000-0001-6271-7355

**To cite this article:** Herasymchuk, L., Krylenko, N., Valerko, R., Patseva, I. (2025). Intehratsiia ESG-kryteriiv ta ekolohichnykh standartiv YeS u systemakh upravlinnia kariernym transportom [Integration of ESG Criteria and EU Environmental Standards into In-Pit Transport Management Systems]. *Problems of Chemistry and Sustainable Development*, 4, 90–97, doi: <https://doi.org/10.32782/pcsd-2025-4-11>

## **INTEGRATION OF ESG CRITERIA AND EU ENVIRONMENTAL STANDARDS INTO IN-PIT TRANSPORT MANAGEMENT SYSTEMS**

**The purpose** of the study to identify and substantiate approaches to integrating ESG criteria, EU environmental standards, and digital regulatory instruments into the management system of in-pit transportation in order to improve environmental performance, transparency, and compliance with the principles of sustainable mining.

**Methodology.** The study applies a comprehensive approach that combines the analysis of EU environmental and legal standards, ESG-compliance principles, and digital tools of environmental regulation. Fuel consumption and emission forecasting models based on machine learning methods were used to assess the environmental impacts and efficiency of transport processes. Scenario analysis of environmental and technological solutions was conducted, and the potential for integrating digital systems such as e-permitting, INSPIRE, and one-stop-shop portals into environmental management practices of mining enterprises was evaluated.

**The scientific novelty** consists in the development and substantiation of an integrated approach to managing in-pit transport operations that brings together the requirements of EU environmental standards, ESG criteria, and digital technologies. A model for assessing environmental efficiency based on predictive digital tools (ML models, Digital Twin, IoT monitoring) is proposed, along with the identification of opportunities for implementing European systems such as e-permitting, INSPIRE, and one-stop-shop in sustainable mining practices.

**Conclusions.** The study summarizes approaches to integrating EU environmental standards, ESG criteria, and digital technologies into the management of in-pit transportation. Sustainable mining requires the combined use of legal,

*managerial, and digital instruments that ensure transparency, environmental efficiency, and corporate responsibility. EU standards (IED, EU Taxonomy, Green Deal) provide a framework for reducing emissions and improving energy efficiency, while ESG criteria support comprehensive assessment of environmental, social, and governance aspects. Digital models, analytics, IoT monitoring, and Digital Twin technology enable accurate impact assessment, logistical optimization, and reduced environmental pressures. European regulatory tools (e-permitting, INSPIRE, one-stop-shop) enhance transparency and support the harmonization of national practices with EU law. The synergy of these solutions shapes a coherent model of sustainable mining and promotes Ukraine's integration into the European environmental framework.*

**Keywords:** *ESG compliance, sustainable mining, EU environmental standards, EU Taxonomy, environmental management, digital technologies, in-pit transportation, Digital Twin, IoT monitoring, e-permitting, INSPIRE, one-stop-shop, green transition, regulatory harmonization, corporate responsibility.*

**Актуальність проблеми.** У сучасних умовах трансформації світових підходів до видобування корисних копалин гірничодобувна галузь України опинилася в центрі змін, зумовлених впливом екологічних, правових, економічних та технологічних чинників. Поглиблення євроінтеграційних процесів, зростання вимог до екологічної відповідальності бізнесу, а також перехід до політики декарбонізації відповідно до Європейського зеленого курсу (EU Green Deal) формують нові рамкові орієнтири для розвитку видобувного сектору. Одним з ключових напрямів цієї трансформації є інтеграція ESG-критеріїв, сучасних стандартів екологічного управління та правових вимог Європейського Союзу у виробничі процеси гірничих підприємств.

Особливого значення набуває сфера внутрішньокар'єрних транспортних операцій, які традиційно формують найбільшу частку енергоспоживання, викидів та визначають рівень техногенного навантаження на довкілля. Транспортні процеси у кар'єрах характеризуються складними умовами експлуатації – значними ухилами доріг, простоями, високою питомою витратою дизельного палива та відсутністю систематизованого цифрового контролю, що робить їх одним з ключових об'єктів екологічного управління та модернізації відповідно до вимог директиви про промислові викиди (IED), Таксономії ЄС, концепції зеленого гірництва та принципів сталого видобутку.

Паралельно з підвищенням екологічних вимог у ЄС активно розвиваються цифрові інструменти регулювання – e-permitting, INSPIRE, цифрові геопортали та моделі «one-stop-shop», які забезпечують автоматизацію процедур екологічного дозволу, прозорість і контроль достовірності даних, зниження корупційних ризиків та інтеграцію екологічних показників у систему управління. Для України впровадження таких підходів має особливе

значення, оскільки дозволяє гармонізувати національні механізми контролю з практиками держав-членів ЄС, підвищити інвестиційну привабливість видобувного сектору та забезпечити прогрес у виконанні міжнародних екологічних зобов'язань.

Зростає роль й сучасних цифрових технологій – IoT-сенсорів, цифрових двійників, машинного навчання та платформізованої логістики, які забезпечують можливість точного прогнозування витрат пального, екологічних ризиків та викидів, а також дозволяють оперативно оптимізувати маршрути, навантаження техніки та режими роботи машин. Інтеграція таких моделей у межах ESG-комплаєнсу створює нову якість управління кар'єрним транспортом, забезпечуючи економічний ефект і відповідність екологічним стандартам.

Отже, актуальність дослідження зумовлена необхідністю: адаптації української гірничої галузі до правових норм та екологічних політик ЄС; впровадження цифрових інструментів, що забезпечують прозорість та ефективність екологічного регулювання; модернізації транспортних процесів на основі ESG-критеріїв і принципів сталого видобутку; переходу до моделей «зеленого гірництва», які поєднують цифровізацію, енергоефективність та корпоративну екологічну відповідальність.

**Аналіз останніх досліджень і публікацій.** Світові тенденції розвитку видобувної промисловості орієнтуються на зниження вуглецевого сліду, ресурсоефективність та прозорість екологічних даних, що визначає перехід індустрії природного каменю до концепції «зеленого гірництва» та впровадження інструментів ESG-комплаєнсу відповідно до вимог права ЄС. Глобальна динаміка ринку природного каменю демонструє зростання попиту й посилення екологічних викликів (Montani, 2022). У дослідженнях українського сектору підкреслюються його ресурсний потенціал, технологічні обмеження,

дисбаланс між видобутком і переробкою, інвестиційні ризики (Filipova & Rasputna, 2018; Saik et al., 2023; Panteleeva et al., 2022; Mykhailov, 2024; Герасимчук та ін., 2025) та проблеми раціонального використання родовищ і вплив гірничих робіт на довкілля (Gavrilyuk et al., 2024; Panteleeva et al., 2022).

Науковці акцентують на потребі модернізації камінеобробної галузі, впровадженні енергоефективних рішень та підвищенні керованості процесів (Saik et al., 2023; Герасимчук та ін., 2025), що узгоджується з європейськими стратегіями декарбонізації та екологічного менеджменту. Міжнародні дослідження підтверджують, що видобувна промисловість є суттєвим джерелом викидів парникових газів, а прозора й деталізована інвентаризація викидів – необхідна умова для формування кліматичної політики, інвестиційної оцінки та відповідності Таксономії ЄС (Zheng et al., 2023; Azadi et al., 2020).

Значну частину робіт присвячено й оптимізації транспортних процесів у кар'єрах із використанням стохастичних, математичних та імітаційних моделей, спрямованих на підвищення енергоефективності та скорочення викидів (Alarie & Gamache, 2002; Ashtiani et al., 2024). Паралельно розробляються рішення на основі дистанційного зондування, ГІС та DSS для моніторингу стану кар'єрних територій (Licciardello et al., 2022). Значна увага приділяється також дослідженню реальних профілів роботи дизельної техніки, фактичних витрат палива та емісій, що підвищує точність моделювання та інвентаризації (Sandhu et al., 2016; Vanasiewicz et al., 2023; Liao et al., 2022). Зазначене формує наукове підґрунтя для впровадження жорсткіших екологічних стандартів і технічних рішень для зменшення забруднення.

В літературі розглядаються економіко-правові аспекти регулювання викидів. Методики екологічного оподаткування, зокрема розрахунку екоподатку за спалювання палива, створюють фінансові стимули для зниження ПММ-споживання та викидів, що корелює з вимогами Директиви про промислові викиди та інструментами регулювання промислового забруднення в ЄС.

Попри значний прогрес у дослідженні декарбонізації видобутку, оптимізації логістики, удосконаленні інвентаризації викидів та прозорості даних, недостатньо вивченими залишаються

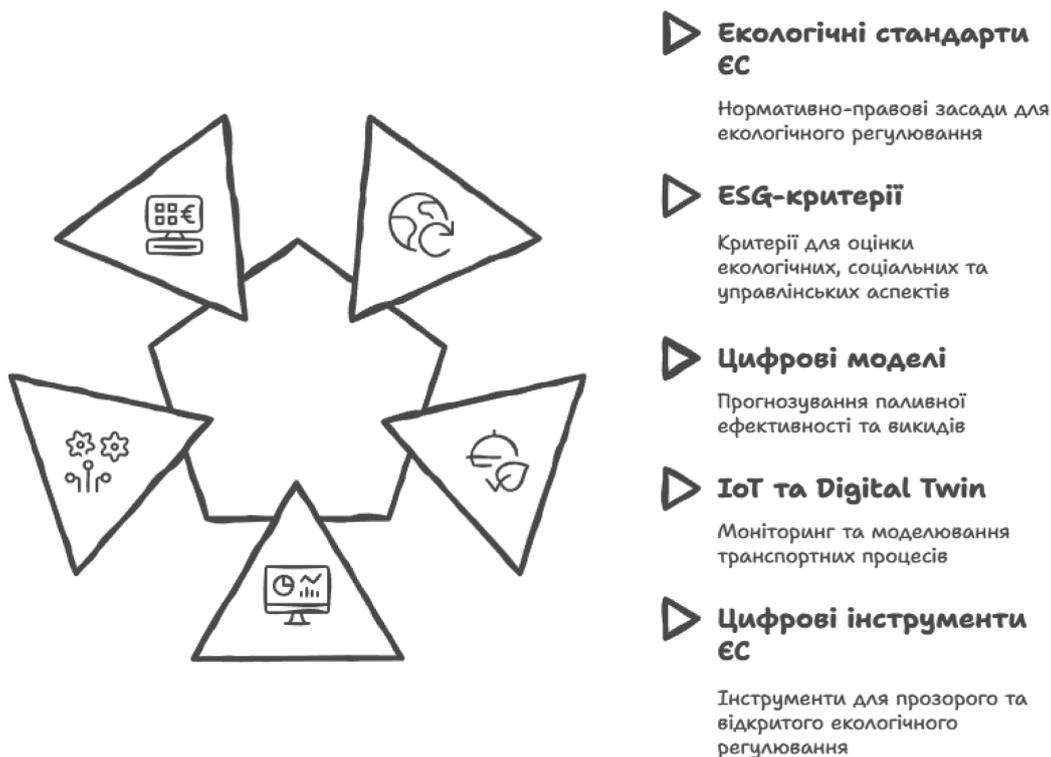
питання інтеграції цифрових моделей управління кар'єрним транспортом із вимогами європейського права та ESG-комплаєнсу, потенціал застосування e-permitting, INSPIRE та one-stop-shop-порталів у гірничому секторі, а також гармонізація національного регулювання з Таксономією ЄС і механізмами «зеленого» фінансування.

**Мета дослідження** – визначення та обґрунтування підходів до інтеграції ESG-критеріїв, екологічних стандартів ЄС та цифрових інструментів регулювання у систему управління внутрішньокар'єрним транспортом з метою підвищення екологічної ефективності, прозорості та відповідності принципам сталого видобутку.

**Виклад основного матеріалу дослідження.** Для узагальнення ключових напрямів екологічної та цифрової трансформації гірничої галузі сформовано концептуальну схему, що відображає основні елементи сучасної моделі сталого видобутку (рис. 1). Наведена інтегрована модель сталого видобутку, яка поєднує екологічні стандарти ЄС, ESG-критерії та сучасні цифрові технології, що демонструє ключові компоненти екологічно відповідного управління гірничими процесами, включно з цифровими моделями, IoT-моніторингом, Digital Twin та європейськими інструментами екологічного регулювання.

*1. Нормативно-правові засади інтеграції екологічних стандартів ЄС у гірничу галузь.* Європейський Союз поступово переходить до жорсткіших моделей екологічного регулювання промисловості, у центрі яких – Директива про промислові викиди (IED), Регламент про Таксономію ЄС, Європейський зелений курс, а також вимоги до нефінансової звітності в межах ESG-комплаєнсу. Для гірничої промисловості ці документи встановлюють стандарти зниження викидів, застосування кращих доступних технологій (BAT), обов'язкового моніторингу, цифрової фіксації екологічних даних та циркулярного підходу до управління ресурсами.

У сфері транспортних процесів ці документи зобов'язують підприємства контролювати викиди CO<sub>2</sub>, NO<sub>x</sub>, SO<sub>2</sub> та твердих частинок, оптимізувати використання дизпалива, забезпечувати вимірюваність і трасованість інтенсивності викидів, використовувати цифрові інструменти доступу до моніторингових



**Рис. 1. Інтегрована модель сталого видобутку на основі екологічних стандартів ЄС, ESG-критеріїв та цифрових інструментів управління**

даних, впроваджувати механізми корпоративної екологічної відповідальності. Гармонізація українського гірничого законодавства з правом ЄС передбачає впровадження тих самих вимог, а отже, адаптація екологічно вразливих процесів, зокрема кар'єрної логістики, є стратегічно важливим кроком для долучення до єдиного європейського ринку.

2. *Роль ESG-критеріїв у модернізації транспортних процесів кар'єрів.* ESG-комплаєнс розглядає діяльність підприємства з трьох позицій:

- Environmental (E) – мінімізація викидів, відповідальне користування паливом, управління ризиками;
- Social (S) – безпека праці, зниження ризиків для здоров'я від викидів та шуму, покращення умов праці машиністів та водіїв;
- Governance (G) – прозорість виробничих процесів, запобігання корупційним практикам у дозволах на розробку родовищ, контроль за достовірністю екологічних даних.

Управління кар'єрним транспортом має високий потенціал впливу саме на E-компонент, оскільки транспорт є основним джерелом забруднення в кар'єрах. Водночас цифровізація логістики істотно впливає й на G-компонент, забезпечуючи прозорість і контроль усіх

операцій, та на S-компонент, зменшуючи ризики для персоналу.

Запровадження ESG-критеріїв у транспортному сегменті дозволяє контролювати екологічні KPI (викиди, ПММ-ефективність), формувати відкриті екологічні звіти згідно з вимогами ЄС, оцінювати вплив кожного логістичного сценарію на сталий видобуток, узгоджувати виробничу політику з «кліматичними» інвестиційними вимогами.

3. *Цифрові моделі прогнозування паливної ефективності та викидів.* Управління кар'єрним транспортом традиційно ґрунтується на емпіричних спостереженнях і досвіді операторів. Проте сучасні підходи ЄС вимагають кількісної оцінки впливів та систематичного моніторингу.

Серед комплексу цифрових моделей, які дозволяють:

1) прогнозувати витрати пального з врахуванням ухилу та профілю доріг, маси та геометрії блоків, фактичних режимів роботи техніки, коефіцієнтів зчеплення, сезонних та кліматичних чинників. Алгоритми машинного навчання (Random Forest, регресійні моделі, нейромережі) забезпечують високу точність прогнозування і адаптивність до змінних виробничих умов;

2) оцінювати викиди CO<sub>2</sub>, NO<sub>x</sub>, SO<sub>2</sub> та PM з використанням емісійних коефіцієнтів, реальних циклів роботи техніки, методики Tier 3, розрахунків вуглецевої інтенсивності на одиницю перевезеного вантажу;

3) моделювати різні сценарії логістики (наприклад: маршрути з мінімальними ухилами, оптимізація швидкісних режимів, зменшення часу простою, перехід на альтернативні види палива (HVO), електрифікація окремих транспортних сегментів) з обґрунтуванням найбільш екологічно доцільних сценаріїв видобутку та транспортування, що повністю відповідає принципам сталого видобутку та EU Taxonomy.

4. *Інтеграція IoT, Digital Twin та візуалізації даних у систему екологічного управління.* Застосування IoT-сенсорів забезпечує автоматичний моніторинг фактичних витрат пального, навантаження на техніку, роботи двигунів, маршруту та швидкісних режимів, реальних викидів. Цифровий двійник (Digital Twin) дозволяє моделювати транспортні процеси у віртуальному середовищі, аналізувати наслідки змін конфігурації доріг, маршрутизації, складу техніки чи сезонних чинників. Зазначені інструменти забезпечують оперативність прийняття рішень, мінімізацію ризиків, суттєве зниження витрат пального, скорочення викидів, підвищення рівня корпоративного екологічного управління.

5. *Європейські цифрові інструменти екологічного регулювання та їх потенціал для України.* У країнах ЄС активно використовуються цифрові механізми, які роблять систему екологічного регулювання прозорою, відкритою та недискримінаційною. Серед ключових:

1) E-permitting (електронні ліцензії, дозволи), що автоматизує дороговартісні дозвільні процедури, має вбудований аналіз екологічних параметрів і наявність цифрової історії рішень та сприяє зниженню корупційних ризиків;

2) INSPIRE дає змогу інтегрувати геопросторові дані про кар'єри, маршрути техніки, зони екологічної чутливості, території, що підлягають охороні, а також дані моніторингу викидів;

3) One-stop-shop portals забезпечують єдине вікно для всіх екологічних процедур, інтеграцію ESG-звітності, ліцензій, дозволів, а також швидкий обмін даними з органами влади та інвесторами.

В цілому, інтеграція зазначених інструментів в Україні дозволить підвищити ефективність

державного регулювання, гармонізувати процедури з правом ЄС, забезпечити відповідність видобутку вимогам сталого розвитку, створити відкритий реєстр екологічних ризиків та рішень.

6. *Синергія екологічних, цифрових та правових рішень у формуванні моделі сталого видобутку.* Поєднання цифрових моделей, вимог екологічного законодавства ЄС та ESG-критеріїв формує комплексний підхід до управління транспортними процесами у кар'єрах. Така інтеграція забезпечує зниження викидів забруднюючих речовин, підвищує енергоефективність, робить процеси прозорими для контролю та аудиту, підтримує підготовку достовірної ESG-звітності, підвищує інвестиційну привабливість підприємств, сприяє гармонізації українського законодавства з правом ЄС.

Таким чином, цифровізація, правова модернізація та екологічне управління утворюють єдиний стратегічний контур, необхідний для переходу української гірничої промисловості до стандартів сталого розвитку.

**Висновки і перспективи подальших досліджень.** Проведене дослідження узагальнило підходи до інтеграції екологічних стандартів ЄС, ESG-критеріїв та цифрових технологій у систему управління внутрішньокар'єрним транспортом. Сталий видобуток вимагає поєднання правових, управлінських та цифрових інструментів, які забезпечують прозорість, екологічну ефективність і відповідальність виробництва. Стандарти ЄС (IED, EU Taxonomy, Green Deal) визначають рамки для зменшення викидів і підвищення енергоефективності, а ESG-критерії – комплексну оцінку екологічних, соціальних та управлінських аспектів діяльності. Цифрові моделі, аналітика, IoT-моніторинг і технологія Digital Twin дають змогу точно оцінювати впливи, оптимізувати логістику та зменшувати навантаження на довкілля. Європейські інструменти регулювання (e-permitting, INSPIRE, one-stop-shop) підсилюють прозорість і сприяють гармонізації практик із правом ЄС. Синергія цих рішень формує цілісну модель сталого видобутку та підтримує інтеграцію України в європейській екологічний простір.

У перспективі подальших досліджень – розроблення інтегрованих цифрових платформ для об'єднання прогнозних моделей, моніторингу та ESG-звітності в єдину систему управління; удосконалення алгоритмів машинного

навчання для точнішого прогнозування викидів та роботи техніки в різних умовах кар'єру; розвиток Digital Twin, що дозволить моделювати повний виробничий цикл із урахуванням екологічних та економічних показників; аналіз можливостей імплементації

європейських цифрових інструментів регулювання (e-permitting, INSPIRE) у національну систему екологічного контролю; оцінка впливу політик ЄС і механізмів зеленого фінансування на модернізацію транспортної інфраструктури та екологічні показники підприємств.

#### ЛІТЕРАТУРА:

1. Герасимчук Л. О., Кириленко Н. П., Валерко Р. А., Пацева І. Г. Екологічні ризики та їх оцінювання в контексті сталого розвитку видобувних підприємств. *Екологічні науки*. 2025. № 3(60). С. 31–36. DOI: 10.32846/2306-9716/2025.есо.3-60.5
2. Герасимчук Л. О., Валерко Р. А., Кириленко Н. П., Пацева І. Г. Інтегрована модель оцінки та управління екологічними ризиками (на прикладі сфери транспортування гірничовидобувних підприємств). *Збірник наукових праць Національного університету кораблебудування імені адмірала Макарова*. 2025. № 2(500). С. 344–352. DOI: 10.15589/znp2025.2(500).45.
3. Alarie S., Gamache M. Overview of Solution Strategies Used in Truck Dispatching Systems for Open Pit Mines. *International Journal of Surface Mining, Reclamation and Environment*. 2002. 16. С. 59–76.
4. Anwar A., Younis M., Ullah I. Impact of Urbanization and Economic Growth on CO<sub>2</sub> Emission: A Case of Far East Asian Countries. *Int J Environ Res Public Health*. 2020. 17(7). 2531. DOI: 10.3390/ijerph17072531
5. Ashtiani M., Moradi A., Doucette J., Nasab H. A Stochastic Energy-Efficient Robust Simulation-Based Truck Dispatching Optimization for Simultaneous GHG Mitigation and Operational Excellence in Open-Pit Mines. *Simulation Modelling Practice and Theory*. 2024. 138. 103026. DOI: 10.1016/j.simpat.2024.103026
6. Azadi M., Northey S. A., Ali S. H., Edraki M. Transparency on greenhouse gas emissions from mining to enable climate change mitigation. *Nature Geoscience*. 2020. 13(2). P. 100–104.
7. Banasiewicz A., Moosavi F., Kotyla M., Śliwiński P., Krot P., Wodecki J., Zimroz R. Forecasting of NO<sub>x</sub> Emissions of Diesel LHD Vehicles in Underground Mines – An ANN-Based Regression Approach. *Applied Sciences*. 2023. 13(17):9965. DOI: 10.3390/app13179965
8. Choomkong A., Sirikunpitak S., Darnsawasdi R., Yordkayhun S. A study of CO<sub>2</sub> Emission Sources and Sinks in Thailand. *Energy Procedia*. 2017. 138. P. 452–457. DOI: 10.1016/j.egypro.2017.10.198.
9. Filipova N., Rasputna T. Ukrainian dimension stone industry: problems and solutions. *Geoingegneria Ambientale e Mineraria (GEAM)*. 2018. 153. P. 5–12.
10. Gavrilyuk R., Negoda I., Lohvynenko O. Assessment of the impact of quarry development within the Ukrainian Shield on groundwater in the context of an environmental impact assessment (using the Vyriv granite quarry as an example). *Collection of Scientific Works of the Institute of Geological Sciences of the NAS of Ukraine*. 2024. 17(1). P. 93–108. DOI: 10.30836/igs.2522-9753.2024.308419
11. Liao J., Hu J., Zhong J., Yan F., Chen P., Hu Y., Zhu L. An experimental investigation of particle and NO<sub>x</sub> emissions for a non-road diesel engine equipped with an integrated DOC+CDPF+SCR aftertreatment system during different operations. *Environmental Science and Pollution Research*. 2022. 29(42), 63815–63836. DOI: 10.1007/s11356-022-20152-x
12. Licciardello, C., Di Marco, A., Biagini, S., Tayeh, K., & Palazzuoli, D. From Remote Sensing to Decision Support System for Industrial Quarry Basins. In book: *Geomatics and Geospatial Technologies*, 2022. P. 385–404. DOI: 10.1007/978-3-030-94426-1\_28
13. Montani, C. XXXIII Rapporto marmo e pietre nel mondo 2022. Carrara, 2022, 312 p.
14. Mykhailov, V. Highly prospective object of the mineral and raw material base of Ukraine. Part 2. Non-metallic minerals. *Visnyk of Taras Shevchenko National University of Kyiv. Geology*. 2024. 3(106). P. 47–56. DOI: 10.17721/1728-2713.106.06.
15. Panteleeva, N. B., Syvyj, M. J., Kalinichenko, O. O., & Volik, O. Building stone resources of Dnipropetrovsk region. *IOP Conference Series: Earth and Environmental Science*. 2022. 1049(1), 012033. DOI: 10.1088/1755-1315/1049/1/012033
16. Saik P., Cherniaiev O., Anisimov O., Dychkovskiy R., Adamchuk A. Mining of non-metallic mineral deposits in the context of Ukraine's reconstruction in the war and post-war periods. *Mining of Mineral Deposits*. 2023. 17(4). P. 91–102. DOI: 10.33271/mining17.04.091
17. Sandhu G. S., Frey H. C., Bartelt-Hunt S., Jones E. Real-world activity, fuel use, and emissions of diesel side-loader refuse trucks. *Atmospheric Environment*. 2016. 129. P. 98–104. DOI: 10.1016/j.atmosenv.2016.01.014
18. Zheng X., Lu Y., Ma C., Yuan J., Stenseth N. C., Hessen D. O., Tian H., Chen D., Chen Y., Zhang S. Greenhouse gas emissions from extractive industries in a globalized era. *Journal of Environmental Management*. 2023. 343(3), 118172. DOI: 10.1016/j.jenvman.2023.118172

## REFERENCES:

1. Herasymchuk, L., Valerko, R., Kyrylenko, N., & Patseva, I. (2025). Ekolohichni ryzyky ta yikh otsiniuvannia v konteksti staloho rozvytku vydobuvnykh pidpryemstv [Environmental risks and their assessment in the context of sustainable development of mining enterprises]. *Ekolohichni nauky – Ecological Sciences*, 3(60), 31–36. DOI: 10.32846/2306-9716/2025.eco.3-60.5 [in Ukrainian].
2. Herasymchuk, L., Valerko, R., Kyrylenko, N., & Patseva, I. (2025). Intehrovana model otsynky ta upravlinnia ekolohichnykh ryzykamy (na prykladi sfery transportuvannia hirnychovydobuvnykh pidpryemstv) [An integrated model for assessing and managing environmental risks (based on the example of the transport operations of mining enterprises)]. *Zbirnyk naukovykh prats Natsionalnoho universytetu korablebuduvannia imeni admirala Makarova – Collection of Scientific Papers of Admiral Makarov National University of Shipbuilding*, № 2(500), 344–352. DOI: 10.15589/znp2025.2(500).45 [in Ukrainian].
3. Alarie, S., & Gamache, M. (2002). Overview of Solution Strategies Used in Truck Dispatching Systems for Open Pit Mines. *International Journal of Surface Mining*, 16, 59–76.
4. Anwar, A., Younis, M., & Ullah, I. (2020). Impact of Urbanization and Economic Growth on CO<sub>2</sub> Emission: A Case of Far East Asian Countries. *Int J Environ Res Public Health*, 17(7):2531. DOI: 10.3390/ijerph17072531
5. Ashtiani, M., Moradi, A., Doucette, J., & Nasab, H. (2024). A Stochastic Energy-Efficient Robust Simulation-Based Truck Dispatching Optimization for Simultaneous GHG Mitigation and Operational Excellence in Open-Pit Mines. *Simulation Modelling Practice and Theory*. 138, 103026. DOI: 10.1016/j.simpat.2024.103026
6. Azadi, M., Northey, S. A., Ali, S. H., & Edraki, M. (2020). Transparency on greenhouse gas emissions from mining to enable climate change mitigation. *Nature Geoscience*. 13(2), 100–104.
7. Banasiewicz, A., Moosavi, F., Kotyla, M., Śliwiński, P., Krot, P., Wodecki, J., & Zimroz, R. (2023). Forecasting of NO<sub>x</sub> Emissions of Diesel LHD Vehicles in Underground Mines – An ANN-Based Regression Approach. *Applied Sciences*, 13(17), 9965. DOI: 10.3390/app13179965
8. Choomkong, A., Sirikunpitak, S., Darnsawasdi, R., & Yordkayhun, S. (2017). A study of CO<sub>2</sub> Emission Sources and Sinks in Thailand. *Energy Procedia*, 138, 452–457. DOI: 10.1016/j.egypro.2017.10.198
9. Filipova, N., & Rasputna, T. (2018). Ukrainian dimension stone industry: problems and solutions. *Geoinżynieria Ambientale e Mineraria (GEAM)*, 153, 5–12.
10. Gavrilyuk, R., Negoda, I., & Lohvynenko, O. (2024). Assessment of the impact of quarry development within the Ukrainian Shield on groundwater in the context of an environmental impact assessment (using the Vyryv granite quarry as an example). *Collection of Scientific Works of the Institute of Geological Sciences of the NAS of Ukraine*, 17(1), 93–108. DOI: 10.30836/igs.2522-9753.2024.308419
11. Liao, J., Hu J., Zhong J., Yan F., Chen P., Hu Y., & Zhu L. (2022). An experimental investigation of particle and NO<sub>x</sub> emissions for a non-road diesel engine equipped with an integrated DOC+CDPF+SCR aftertreatment system during different operations. *Environmental Science and Pollution Research*, 29(42), 63815–63836. DOI: 10.1007/s11356-022-20152-x
12. Licciardello, C., Di Marco, A., Biagini, S., Tayeh, K., & Palazzuoli, D. (2022). From Remote Sensing to Decision Support System for Industrial Quarry Basins. In book: *Geomatics and Geospatial Technologies*. DOI: 10.1007/978-3-030-94426-1\_28
13. Montani, C. (2022). XXXIII Rapporto marmo e pietre nel mondo 2022. Carrara. 312 p.
14. Mykhailov, V. (2024). Highly prospective object of the mineral and raw material base of Ukraine. Part 2. Non-metallic minerals. *Visnyk of Taras Shevchenko National University of Kyiv. Geology*, 3(106), 47–56. DOI: 10.17721/1728-2713.106.06
15. Panteleeva, N. B., Syvyj, M. J., Kalinichenko, O. O., & Volik, O. (2022). Building stone resources of Dnipropetrovsk region. *IOP Conference Series: Earth and Environmental Science*, 1049(1), 012033. DOI: 10.1088/1755-1315/1049/1/012033
16. Saik, P., Cherniaev, O., Anisimov, O., Dychkovskiy, R., & Adamchuk, A. (2023). Mining of non-metallic mineral deposits in the context of Ukraine's reconstruction in the war and post-war periods. *Mining of Mineral Deposits*, 17(4), 91–102. DOI: 10.33271/mining17.04.091
17. Sandhu, G. S., Frey, H. C., Bartelt-Hunt, S., & Jones, E. (2016). Real-world activity, fuel use, and emissions of diesel side-loader refuse trucks. *Atmospheric Environment*, 129, 98–104. DOI: 10.1016/j.atmosenv.2016.01.014
18. Zheng, X., Lu, Y., Ma, C., Yuan, J., Stenseth, N. C., Hessen, D. O., Tian, H., Chen, D., Chen, Y., & Zhang, S. (2023). Greenhouse gas emissions from extractive industries in a globalized era. *Journal of Environmental Management*, 343(3), 118172. DOI: 10.1016/j.jenvman.2023.118172

Стаття надійшла: 20.11.2025

Прийнято: 05.12.2025

Опубліковано: 30.12.2025

УДК 502.175:502.3

DOI <https://doi.org/10.32782/pcsd-2025-4-12>

**Людмила ГРИГОР'ЄВА**

завідувачка кафедри екології, Чорноморський національний університет імені Петра Могили,  
вул. 68 Десантників, 10, м. Миколаїв, Україна, 54003

**ORCID:** 0000-0001-9452-2982

**Scopus Author ID:** 49963633100

**Костянтин ГРИГОР'ЄВ**

аспірант кафедри екології, Чорноморський національний університет імені Петра Могили,  
вул. 68 Десантників, 10, м. Миколаїв, Україна, 54003

**ORCID:** 0000-0003-2804-2758

**Scopus Author ID:** 49963356000

**Бібліографічний опис статті:** Григор'єва, Л., Григор'єв, К. (2025). Методологія використання дозових цін при експрес-оцінюванні та моделюванні ефективної дози від газоаерозольних викидів радіонуклідних полютантів. *Проблеми хімії та сталого розвитку*, 4, 98–104, doi: <https://doi.org/10.32782/pcsd-2025-4-12>

**МЕТОДОЛОГІЯ ВИКОРИСТАННЯ ДОЗОВИХ ЦІН  
ПРИ ЕКСПРЕС ОЦІНЮВАННІ ТА МОДЕЛЮВАННІ ЕФЕКТИВНОЇ ДОЗИ  
ВІД ГАЗОАЕРОЗОЛЬНИХ ВИКИДІВ РАДІОНУКЛІДНИХ ПОЛЮТАНТІВ**

Стаття присвячена висвітленню розробленої методології використання дозових цін при радіоекологічному моделюванні ситуації. Використовуючи результати радіоекологічних досліджень авторів застосовано метод, заснований на визначенні нормалізованих показників ефективних доз, які дозволятимуть оперативно визначати ефективну дозу опромінення людини від техногенних джерел іонізуючого випромінювання, в першу чергу пов'язаних з газоаерозольними викидами АЕС.

Для визначення нормалізованих ефективних доз від газоаерозольних викидів встановлювали показники, які виступали базовими радіаційними характеристиками цих джерел. Використано поняття «дозова ціна» (*dose price*) джерела іонізуючого випромінювання – показник, який за своїм змістом відображує річну ефективну дозу опромінення від радіонукліду, приведену до одиниці впливу джерела. При надходженні у довкілля суміші радіонуклідів встановлювали базовий (реперний) радіонуклід BR (або декілька) – який мав більшу вагомість у величині сумарної дози і в об'ємі газоаерозольного викиду, та визначали ефективну дозову ціну.

Ця методологія застосована до представленої камерної моделі перенесення радіонуклідів, які було викинуто у довкілля з газоаерозольними викидами Південноукраїнської АЕС. Показано, що річна ефективна доза опромінення людини від радіонуклідів газоаерозольних викидів АЕС представляє собою суму річних ефективних доз: ефективної дози зовнішнього опромінення людини від хмари викидів і від радіонуклідів, що випали на землю, та ефективної дози внутрішнього опромінення людини через інгаляційне надходження радіонуклідів.

Апробація методики здійснена на підставі встановленого авторами раніше факту, що головний внесок (63 %) у формування радіаційного навантаження на людину від інгаляційного надходження суміші радіонуклідів газоаерозольних викидів приходилося на  $^{131}\text{I}$ . Тому реперним радіонуклідом було обрано  $^{131}\text{I}$ . Базовою радіаційною характеристикою прийнято величину потужності викиду радіонукліду. Розрахунки, які проведено за цією методикою для території на відстані 2,5 км від АЕС, показали, що величина ефективної дозової ціни від газоаерозольного викиду суміші радіонуклідів склала величини на рівні 0,01–1,05 мкЗв/рік на 1 Бк/с викиду  $^{131}\text{I}$ . Важливою умовою прогнозування за допомогою дозиметричних моделей є їхня надійність. У роботі застосовано методику статистичного експерименту і стохастичного моделювання Монте-Карло для оцінювання надійності методики. Результати свідчили, що у моделі деякі фактори є істотними. Це обумовлено тим, що головний внесок в інгаляційну дозу від газоаерозольних викидів радіонуклідів здійснюють, крім  $^{131}\text{I}$ , також  $^{60}\text{Co}$  та  $^{137}\text{Cs}$ .

Стохастичне прогнозування ефективної дози від газоаерозольних викидів АЕС з використанням визначених дозових цін підтвердило надійність представленої моделі при оперативному прогнозуванні дозового навантаження на населення від газоаерозольних викидів АЕС.

**Ключові слова:** методологія, газоаерозольні викиди радіонуклідів, модель, дозова ціна, атмосферне повітря.

**Liudmyla GRYGORIEVA**

Head of the Department of Ecology, Petro Mohyla Black Sea National University, 10 68 Desantnykiv str., Mykolaiv, Ukraine, 54003

**ORCID:** 0000-0001-9452-2982

**Scopus Author ID:** 49963633100

**Kostiantyn GRYGORIEV**

Postgraduate Student at the Department of Ecology, Petro Mohyla Black Sea National University, 10 68 Desantnykiv str., Mykolaiv, Ukraine, 54003

**ORCID:** 0000-0003-2804-2758

**Scopus Author ID:** 49963356000

**Бібліографічний опис статті:** Grygorieva, L., Grygoriev, K. (2025). Metodolohiia vykorystannia dozovykh tsin pry ekspres otsiniuvanni ta modeliuvanni efektyvnoi dozy vid hazoerozolnykh vykydiv radionuklidnykh poliutantiv [Methodology for using dose prices in rapid assessment and modelling of effective doses from gas-aerosol emissions of radionuclide pollutants]. *Problems of Chemistry and Sustainable Development*, 4, 98–104, doi: <https://doi.org/10.32782/pcsd-2025-4-12>

## METHODOLOGY FOR USING DOSAGE PRICES IN EXPRESS ASSESSMENT AND MODELLING OF EFFECTIVE DOSES FROM GASEOUS AEROSOL EMISSIONS OF RADIONUCLIDES

The article is devoted to highlighting the developed methodology for using dose prices in radioecological modelling of situations. Using the results of radioecological studies, the authors applied a method based on determining normalised effective dose indicators, which will allow for the rapid determination of the effective dose of human exposure to man-made sources of ionising radiation, primarily associated with gas-aerosol emissions from nuclear power plants.

To determine the normalised effective doses from gas-aerosol emissions, indicators were established that served as the basic radiation characteristics of these sources. The concept of the 'dose price' of an ionising radiation source was used – an indicator that reflects the annual effective dose of radiation from a radionuclide, reduced to a unit of source impact. When a mixture of radionuclides entered the environment, a base (reference) radionuclide BR (or several) was established, which had greater weight in the total dose and in the volume of gas-aerosol emissions, and the effective dose price was determined.

This methodology was applied to the presented chamber model of radionuclide transport, which was released into the environment with gas-aerosol emissions from the South Ukraine NPP.

It has been shown that the annual effective dose of human exposure to radionuclides from gas-aerosol emissions from nuclear power plants is the sum of the annual effective doses: the effective dose of external exposure of humans from the emission cloud and from radionuclides that have fallen to the ground, and the effective dose of internal exposure of humans through inhalation of radionuclides.

The methodology was tested based on the fact established earlier by the authors that the main contribution (63 %) to the radiation exposure of humans from the inhalation of a mixture of radionuclides from gas-aerosol emissions was made by  $^{131}\text{I}$ . Therefore,  $^{131}\text{I}$  was chosen as the reference radionuclide. The basic radiation characteristic is taken to be the power of radionuclide emission. Calculations performed using this methodology for the territory at a distance of 2.5 km from the NPP showed that the effective dose rate from the gas-aerosol emission of the radionuclide mixture ranged from 0.01 to 1.05  $\mu\text{Sv}/\text{year}$  per 1 Bq/s of  $^{131}\text{I}$  emission. An important condition for forecasting using dosimetric models is their reliability. The paper applies the methodology of statistical experiment and Monte Carlo stochastic modelling to assess the reliability of the methodology. The results showed that some factors are significant in the model. This is due to the fact that, in addition to  $^{131}\text{I}$ ,  $^{60}\text{Co}$  and  $^{137}\text{Cs}$  also make a significant contribution to the inhalation dose from gas-aerosol emissions of radionuclides. Stochastic forecasting of the effective dose from gas-aerosol emissions of nuclear power plants using defined dose values confirmed the reliability of the presented model in the operational forecasting of the dose load on the population from gas-aerosol emissions of nuclear power plants.

**Keywords:** methodology, gas-aerosol emissions of radionuclides, model, dose price, atmospheric air.

**Актуальність проблеми.** Прогнозування радіаційного стану на території в зоні впливу газоаерозольних викидів АЕС було актуально до воєнних дій (Богорад, 2020, Новосолов,

2019), а особливо актуалізувалося під час воєнних дій на території нашої держави (Ангу-рець, 2023, Литвиненко, 2023). Це пов'язано з підвищенням ризиків радіоекологічних

аварій, загрози зміни радіаційної ситуації, потрапляння радіонуклідів в атмосферне повітря внаслідок постійних обстрілів з боку РФ ракетами та безпілотниками територій поблизу АЕС (Ангурець, 2023, с. 45).

Одним з методів, які дозволяють оперативно прогнозувати радіаційну ситуацію і радіаційне навантаження на людину, є метод, заснований на визначенні коефіцієнтів переходу від радіаційних характеристик джерела іонізуючого випромінювання – до ефективної дози опромінення людини (Кустов, 2019, Сидоренко, 2020). Для оперативної орієнтації у рівнях радіаційного навантаження на населення в якості таких коефіцієнтів використовують нормалізовані показники ефективної дози – ефективні дози, віднесені до щільності випадіння радіонуклідів (в одиницях Зв/(Бк/м<sup>2</sup>)).

Тому одне з завдань роботи полягало у встановленні коефіцієнтів (нормалізованих показників ефективних доз), які дозволятимуть оперативно визначати ефективну дозу опромінення людини від техногенних джерел іонізуючого випромінювання, в першу чергу пов'язаних з газоаерозольними викидами АЕС.

**Мета дослідження:** представити методику визначення нормалізованих показників ефективної дози для експрес оцінювання ефективної дози опромінення людини від газоаерозольних викидів радіонуклідних полютантів.

**Матеріали і методи дослідження.** Для визначення нормалізованих ефективних доз від газоаерозольних викидів встановлювали показники, які виступали базовими радіаційними характеристиками цих джерел. Визначення нормалізованих ефективних доз опромінення людини здійснювали за формулою:

$$d\_pr_{i,n} = \bar{H}_{i,n} = \frac{H_{i,n}}{BRD_{i,n}}, \quad (1)$$

де  $d\_pr_{i,n}$  – дозова ціна (dose price) джерела  $n$  іонізуючого випромінювання за радіонуклідом  $i$ , (Зв/рік)/(Бк/м<sup>3</sup>), залежно від  $BRD_{i,n}$ ;  $H_{i,n}$  – річна ефективна доза від радіонукліду  $i$  від джерела випромінювання  $n$ , Зв/рік;  $BRD_{i,n}$  – базова радіаційна характеристика джерела  $n$  іонізуючого випромінювання, визначена за радіонуклідом  $i$ , Бк/м<sup>3</sup>.

$BRD_{i,n}$  – це показник, який характеризує радіонуклідне забруднення об'єкта довкілля, що стоїть на початку дозоформуєчого ланцюга та

враховує інші чинники, які модифікують вплив радіонуклідного забруднення цього об'єкта на людину.

Через те, що показник  $d\_pr_{i,n}$  за своїм змістом відображує річну ефективну дозу опромінення від радіонукліду  $i$ , приведену до одиниці впливу джерела  $n$ , то його названо «дозовою ціною джерела  $n$  за радіонуклідом  $i$ ». Аналогічне поняття «дозова ціна аварійного забруднення» застосовано в роботі [29] для оцінки радіаційного навантаження за усіма шляхами надходження «аварійно-чорнобильських» радіонуклідів до людини. При надходженні у довкілля суміші радіонуклідів встановлювали базовий (реперний) радіонуклід  $BR$  (або декілька) – який мав більшу вагомість у величині сумарної дози і в об'ємі газоаерозольного викиду, та визначали ефективну дозову ціну ( $d\_pr_n^*$ ) джерела  $n$ , як зважену суму відповідних дозових цін за окремими радіонуклідами:

$$d\_pr_n^* = d\_pr_{BR,n} + \sum_{i \neq BR} \left( d\_pr_{i,n} \times \frac{BRD_{i,n}}{BRD_{BR,n}} \right), \quad (2)$$

де  $d\_pr_{BR,n}$  – дозова ціна джерела  $n$  за радіонуклідом  $BR$ ;  $BRD_{BR,n}$  – базова радіаційна характеристика, яка визначена за радіонуклідом  $BR$ .

Такий підхід дозволяє прогнозувати ефективну дозу опромінення людини від суміші радіонуклідів за активністю одного радіонукліду:

$$H_n^{inhal} = d\_pr_{BR,n}^* \times BRD_{BR,n}, \quad (3)$$

де  $H_n^{inhal}$  – річна ефективна доза внутрішнього опромінення людини від суміші радіонуклідів з джерела  $n$ , Зв/рік.

Важливою умовою прогнозування за допомогою дозиметричних моделей є їхня надійність. У роботі застосовано методику статистичного експерименту і стохастичного моделювання Монте-Карло, за якою параметри перенесення радіонуклідів і співвідношення  $\frac{BRD_{i,n}}{BRD_{BR,n}}$  рандомізувалися шляхом дослідження величин їх статистичних характеристик, і для кожного випадкового набору параметрів моделювалися дози, а результати обробляли як статистичний матеріал.

**Основний матеріал дослідження.** На рисунку 1 представимо камерну модель перенесення радіонуклідних полютантів, за якою

ми оцінювали шляхи формування ефективної дози опромінення людини від радіонуклідів, що надходять у довкілля з газоаерозольними викидами АЕС. Жирним шрифтом виділено камеру – викид радіонукліду  $i$  з АЕС, радіаційні характеристики якої (потужність викиду  $Q_{i,extr}$ , Бк/с) прийнято за базову радіаційну характеристику  $BRD$ .

Окрім ефективної дози зовнішнього опромінення людини від хмари викидів ( $H_{extr}^{ext}$ ) і зовнішнього опромінення від радіонуклідів, що випали на землю, формується доза внутрішнього опромінення людини через інгаляційне ( $H_{extr}^{inhal}$ ) надходження радіонуклідів. Тому при визначенні дозової ціни газоаерозольних викидів АЕС потрібно враховувати ці шляхи формування ефективної дози опромінення людини внаслідок газоаерозольних викидів радіоактивних речовин. Тобто, сумарна річна ефективна доза опромінення людини від їхніх радіонуклідів в результаті газоаерозольних викидів АЕС ( $H_{extr}$ ) представляє собою суму річних ефективних доз:

$$H_{extr} = H_{extr}^{ext} + H_{extr}^{inhal}.$$

Нами раніше (Григор'єва, 2025, с. 39) визначено, що головний внесок (63 %) у формування радіаційного навантаження на людину від

інгаляційного надходження суміші радіонуклідів газоаерозольних викидів ( $H_{extr}^{inhal}$ ) приходилося на  $^{131}\text{I}$ . Тому реперним радіонуклідом було обрано  $^{131}\text{I}$ .

Базовою радіаційною характеристикою прийнято величину потужності викиду радіонукліду  $i$ :  $BRD_{i,extr} = Q_{i,extr}$  (Бк/с). Потрібно врахувати також модифікуючі фактори: фактор метеорологічного розбавлення домішок у приземному шарі атмосфери і відстань від АЕС. Нами визначалися «дозові ціни» газоаерозольних викидів АЕС для території радіусом 2,5 км від ПУ АЕС, тому можна обмежитися нормалізацією лише за  $Q_{i,extr}$ , і за (1) вираз для визначення дозових цін газоаерозольних викидів АЕС має вигляд:

$$d_{pr_i} = \bar{H}_{i,extr} = \frac{H_{i,extr}}{BRD_{i,extr}} = \frac{H_{i,extr}}{Q_{i,extr}}.$$

Отримаємо ефективні дозові ціни газоаерозольних викидів АЕС відповідно за інгаляційним шляхом та при зовнішньому опроміненні:

$$d_{pr_{extr}^{*inhal}} = d_{pr_{BR,extr}^{inhal}} + \sum_{i \neq BR} \left( d_{pr_{i,extr}} \times \frac{Q_{i,extr}}{Q_{BR,extr}} \right);$$

$$d_{pr_{extr}^{*ext}} = d_{pr_{BR,extr}^{ext}} + \sum_{i \neq BR} \left( d_{pr_{i,extr}} \times \frac{Q_{i,extr}}{Q_{BR,extr}} \right).$$

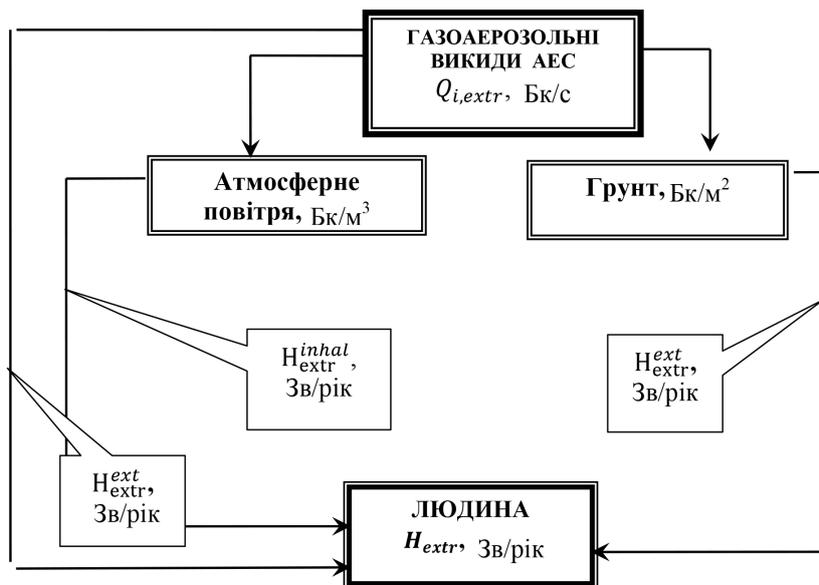


Рис. 1. Камерна модель формування радіаційного навантаження на людину від радіонуклідів, які надходять у довкілля з газоаерозольними викидами АЕС. Позначення:  $H_{extr}$  – річна ефективна доза опромінення людини внаслідок газоаерозольних викидів радіонуклідів;  $H_{extr}^{ext}$  – річна ефективна доза зовнішнього опромінення людини;  $H_{extr}^{inhal}$  – річна ефективна доза внутрішнього опромінення людини при інгаляційному надходженні радіонуклідів

де  $Q_{BR,extr}$  – потужність викиду базового радіонукліду в атмосферне повітря, Бк/с.

Обчислення, які проведені відносно базового радіонукліду  $^{131}\text{I}$  для території на відстані 2,5 км від АЕС показали:

- величини ефективної дозової ціни  $d_{pr_{extr}^{*ext}}$  на рівні 0,01–0,5 мкЗв/рік на 1 Бк/с викиду  $^{131}\text{I}$ ,
- величини ефективної дозової ціни  $d_{pr_{extr}^{*inhal}}$  на рівні (0,07–1,05) мкЗв/рік на 1 Бк/с викиду  $^{131}\text{I}$ .

– величини ефективної дозової ціни  $d_{pr_{extr}^{*ext}}$  на рівні (0,01–1,05) мкЗв/рік на 1 Бк/с викиду  $^{131}\text{I}$ .

Таким чином, отримаємо модель для прогнозування радіаційного навантаження на людину через газоаерозольні викиди радіонуклідів з АЕС:

$$H_{extr} = d_{pr_{extr}^{*ext}} \cdot Q_{^{131}\text{I},extr}, \quad (4)$$

де  $Q_{^{131}\text{I},extr}$  – потужність викиду  $^{131}\text{I}$ , Бк/с.

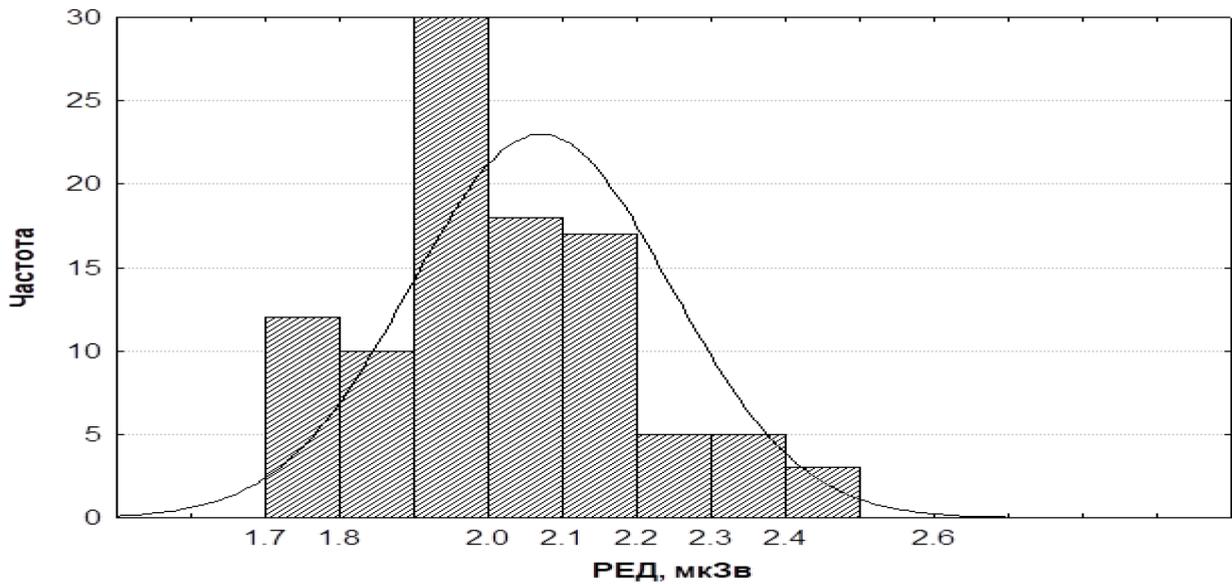


Рис. 2. Гістограма розподілу результатів моделювання формування річної ефективної дози  $H_{extr}$  у районі ПУ АЕС (2,5 км від АЕС) внаслідок газоаерозольних викидів АЕС

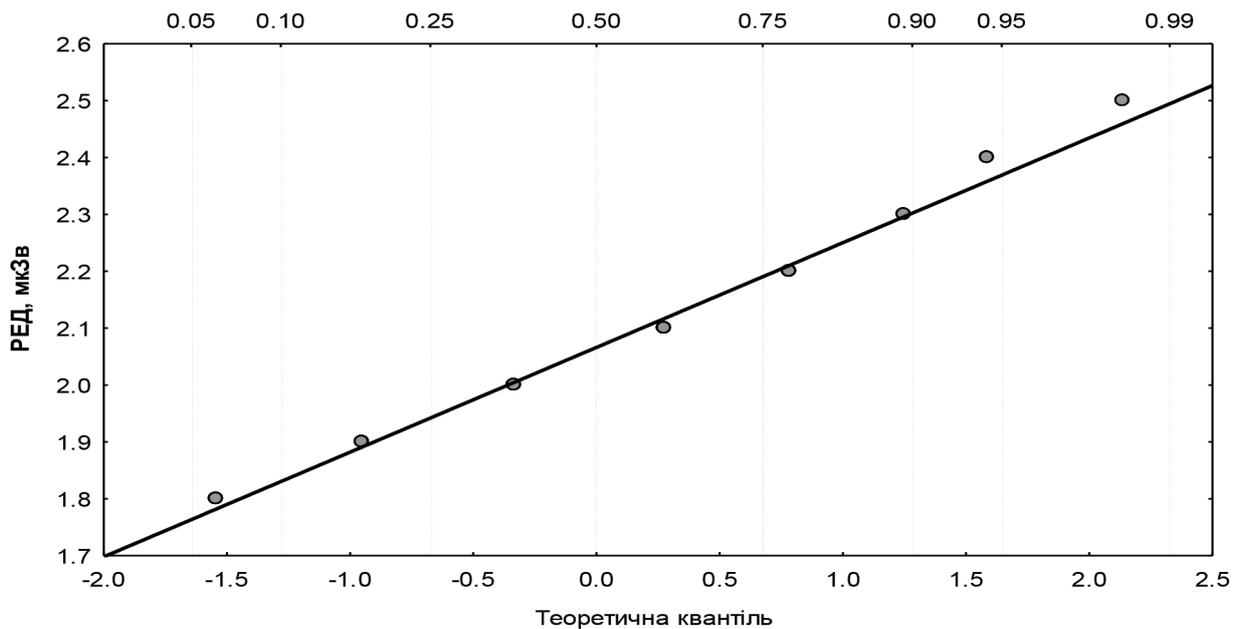


Рис. 3. Пробіт-графік розподілу результатів моделювання формування річної ефективної дози  $H_{extr}$  від газоаерозольних викидів радіонуклідів у районі ПУ АЕС (2,5 км від АЕС)

Перевіримо надійність стохастичного прогнозування ефективної дози  $H_{extr}$  від газоаерозольних викидів радіонуклідів у районі ПУ АЕС (2,5 км від АЕС. При такому моделюванні невизначеністю характеризуються змінні величини  $\frac{Q_{i,extr}}{Q_{BR,extr}}$ ,  $Q_{^{131}I,extr}$ . Границі змін цих змінних взято як мінімальні і максимальні значення, визначені за результатами проведених досліджень і даних [7, 9] за період 2019–2021 рр.

Здійснюючи 100 випробувань моделі (4) при параметрах, значення яких випадковим чином вибиралися з їхніх інтервалів змін, отримаємо результати, які у вигляді гістограми наведено на рис. 2, а у вигляді пробіт-графіку – на рис. 3.

Пробіт-графік і гістограма показують, що змодельований розподіл може істотно відрізнятися від нормального. Це може свідчити про те, що у моделі деякі фактори є істотними. У даному випадку це очевидно: головний внесок в інгаляційну дозу від газоаерозольних викидів радіонуклідів здійснюють, крім  $^{131}I$ ,  $^{60}Co$  та  $^{137}Cs$  (Богорад, 2019, Григор'єва, 2025), тому рівномірний закон розподілу цих радіонуклідів практично відображується у закон розподілу дози.

**Висновки і перспективи подальших досліджень.** Представлено результати моделювання формування ефективної дози опромінення людини від газоаерозольних викидів АЕС, використовуючи методологію нормалізованих дозових цін джерела випромінювання та камерних моделей.

Показано, що для оперативного прогнозування рівнів середньоіндивідуальної ефективної дози може виступати показник дозової ціни газоаерозольних викидів радіонуклідів. При цьому базовим/реперним радіонуклідом виступає  $^{131}I$ , а базовою радіаційною характеристикою – потужність викиду  $^{131}I$ .

Для умов територій навколо ПУАЕС (2,5 км) розраховано, величини ефективної дозової ціни газоаерозольних викидів АЕС, які склали (0,01–1,05) мкЗв/рік на 1 Бк/с викиду  $^{131}I$ .

Стохастичне прогнозування ефективної дози від газоаерозольних викидів АЕС з використанням визначених дозових цін підтвердило надійність представлені моделі при оперативному прогнозуванні дозового навантаження на населення від газоаерозольних викидів АЕС.

#### ЛІТЕРАТУРА:

1. Ангурець О., Хазан П., Колесникова К., Куш М., Чернохова М., Гавранек М. Україна, шкода довкіллю, екологічні наслідки війни. 2023. 84 с.
2. Богорад В. І., Сlepченко О. Ю., Литвинська Т. В., Белих Д. О., Калита І. А., Полудненко В. А. Радіаційні аспекти захисту населення на етапі раннього викиду в разі важкої аварії на АЕС. Ядерна та радіаційна безпека. 3(87). 2020. С. 62–73.
3. Григор'єва Л., Григор'єв К. Ефективна доза іонізуючого випромінювання від викидів  $^{131}I$  з АЕС. *Екологічні науки*. 2025. № 3 (60). С. 37–41.
4. Кустов М., Слепужніков Е., Ліповой В, Хмирьов І., Дадашов І., Бускін О. Процедура реалізації методу штучного осадження радіоактивних речовин з атмосфери. *Ядерна та радіаційна безпека*. 2019. № 3(83). С. 13–25.
5. Литвиненко А. С. Військово-технологічні та соціогуманітарні дослідження в Національній Академії наук України під час російсько-української війни. *Наука та наукознавство*. 2023. № 2 (120). С. 95–115.
6. Новосолов Г., Масько М. Про радіаційний вплив Запорізької та Южно-Української АЕС на навколишнє середовище. *Ядерна енергетика та довкілля*. 2019. № 2 (14). С. 58–70.
7. Радіаційна обстановка в районі розташування ЮУАЕС за 2018–2021 рр. : звіти лабораторії зовнішньої дозиметрії ЮУАЕС. 2021. 124 с.
8. Сидоренко В. Л. Екологічна безпека Чорнобильської зони відчуження: техноприродні загрози від радіаційно небезпечних об'єктів і явищ. Дисертація на...д-ра техн. наук. 2020. 470 с.
9. Южно-Українська АЕС. Енергоблок № 3: звіт з періодичної переоцінки безпеки. Фактор безпеки № 14. Вплив на навколишнє середовище. Київ. 2019. 158 с

#### REFERENCES:

1. Anhurets, O., Khazan, P., Kolesnykova, K., Kushch, M., Chernokhova, M., & Havranek, M. (2023). *Ukraine, shkoda dovkilliu, ekolohichni naslidky viiny. [Ukraine, environmental damage, ecological consequences of war]*. 84 [in Ukrainian]
2. Bohorad, V. I., Slepchenko, O. Yu., Lytvynska, T. V., Bielykh, D. O., Kalyta, I. A., & Poludnenko, V. A. (2020). *Radiatsiini aspekty zakhystu naseleunia na etapi rannoho vykydu v razi vazhkoj avarii na AES [Radiation aspects of*

protecting the population during the early release phase in the event of a severe accident at a nuclear power plant]. *Yaderna ta radiatsiina bezpeka – Nuclear and radiation safety*, (3 (87). 62–73 [in Ukrainian]

3. Hryhorieva, L., & Hryhoriev, K. (2025). Efektyvna doza ionizuiuchoho vyprominiuvannia vid vykydiv  $^{131}\text{I}$  z AES. [Effective dose of ionising radiation from  $^{131}\text{I}$  emissions from nuclear power plants]. *Ekolohichni nauky – Environmental sciences*, № 3 (60). 37–41 [in Ukrainian]

4. Kustov, M., Slepuzhnikov, E., Lipovoi, V., Khmyrov, I., Dadashov, I., Buskin, O. (2023). Protsedura realizatsii metodu shtuchnoho osadzhennia radioaktyvnykh rehovyn z atmosfery [Procedure for implementing the method of artificial precipitation of radioactive substances from the atmosphere.] *Yaderna ta radiatsiina bezpeka – Nuclear and radiation safety*. 3 (83). 13–25 [in Ukrainian]

5. Lytvynenko, A. S. (2023). Viiskovo-tekhnologichni ta sotsiohumanitarni doslidzhennia v Natsionalnii Akademii nauk Ukrainy pid chas rosiisko-ukrainskoi viiny [Military-technological and socio-humanitarian research at the National Academy of Sciences of Ukraine during the Russian-Ukrainian war] *Nauka ta naukoznavstvo – Science and science studies*. 2 (120). 95–115. [in Ukrainian]

6. Novosolov, H., & Masko, M. (2019). Pro radiatsiinyi vplyv Zaporizkoi ta Yuzhno-Ukrainskoi AES na navkolyshnie seredovyshe [On the radiation impact of the Zaporizhzhya and South Ukraine Nuclear Power Plants on the environment.] *Yaderna enerhetyka ta dokillia – Nuclear energy and the environment*. 2 (14). 58–70. [in Ukrainian]

7. Radiatsiina obstanovka v raioni roztashuvannia YuUAES za 2019–2021 rr. (2021) [Radiation situation in the area surrounding the South Ukraine Nuclear Power Plant in 2018–2021]. *Zvity laboratorii zovnishnoi dozimetrii YuUAES – Mykolaiv – Reports from the external dosimetry laboratory of the SU AEPS*. 124. [in Ukrainian]

8. Sydorenko, V. L. (2020). Ekolohichna bezpeka Chornobylskoi zony vidchuzhennia: tekhnopryrodny zahrozy vid radiatsiino nebezpechnykh ob'ektiv i yavlyshch [Environmental safety of the Chernobyl exclusion zone: technological and natural threats from radiation-hazardous objects and phenomena. Dissertation for the degree of Doctor of Technical Sciences]. *Doctor's thesis*. Sumy : NAU. 2020. 470. [in Ukrainian]

9. Iuzhno-Ukrainska AES. Enerhoblok № 3 : zvit z periodychnoi pereotsinky bezpeky. Faktor bezpeky № 14. Vplyv na navko lyshnie seredovyshe. (2019) [South Ukraine Nuclear Power Plant. Power Unit No. 3: Periodic Safety Review Report. Safety Factor No. 14. Impact on the Environment.] Kyiv. 158 [in Ukrainian]

Стаття надійшла: 22.11.2025

Прийнято: 10.12.2025

Опубліковано: 30.12.2025

УДК 502.3:625.765]:005.334

DOI <https://doi.org/10.32782/pcsd-2025-4-13>

**Ольга КАРАЇМ**

кандидат економічних наук, доцент, доцент кафедри екології та охорони навколишнього середовища, Волинський національний університет імені Лесі Українки, просп. Волі, 13, м. Луцьк, Волинська обл., Україна, 43025

**ORCID:** 0000-0002-1722-4110

**Олександр БАКАРАЄВ**

засновник ТОВ «ВОЛИНЬЕКОПРОМПРОЕКТ», вул. Гулака-Артемівського, 7, м. Луцьк, Волинська обл., Україна, 43005

**ORCID:** 0000-0002-6876-2840

**Володимир КАРАЇМ**

аспірант, Волинський національний університет імені Лесі Українки, просп. Волі, 13, м. Луцьк, Волинська обл., Україна, 43025

**ORCID:** 0000-0003-4053-8019

**Зоряна ЛАВРИНЮК**

кандидат хімічних наук, доцент, доцент кафедри екології та охорони навколишнього середовища, Волинський національний університет імені Лесі Українки, просп. Волі, 13, м. Луцьк, Волинська обл., Україна, 43025

**ORCID:** 0000-0002-1906-3330

**Олена ДЖАМ**

кандидат хімічних наук, доцент, доцент кафедри екології та охорони навколишнього середовища, Волинський національний університет імені Лесі Українки, просп. Волі, 13, м. Луцьк, Волинська обл., Україна, 43025

**ORCID:** 0000-0003-2222-3734

**Людмила САВЧУК**

кандидат біологічних наук, доцент, доцент кафедри екології та охорони навколишнього середовища, Волинський національний університет імені Лесі Українки, пр. Волі, 13, м. Луцьк, Волинська обл., Україна, 43025

**ORCID:** 0000-0002-8854-6600

**Бібліографічний опис статті:** Караїм, О., Бакараєв, О., Караїм, В., Лавринюк, З., Джем, О., Савчук, Л. (2025). Оцінювання ризиків від викидів виробництва асфальтобетонного дорожнього покриття як чинник забезпечення сталого розвитку. *Проблеми хімії та сталого розвитку*, 4, 105–115, doi: <https://doi.org/10.32782/pcsd-2025-4-13>

## ОЦІНЮВАННЯ РИЗИКІВ ВІД ВИКИДІВ ВИРОБНИЦТВА АСФАЛЬТОБЕТОННОГО ДОРОЖНЬОГО ПОКРИТТЯ ЯК ЧИННИК ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ СТАЛОГО РОЗВИТКУ

**Метою дослідження** є здійснення оцінки неканцерогенного та канцерогенного ризиків від викидів виробництва асфальтобетонного дорожнього покриття як чинника забезпечення сталого розвитку.

**Методи.** Аналітичні, розрахункові, експериментальні, порівняльні, інформаційного моделювання та прогнозування.

**Результати дослідження.** Здійснено оцінювання екологічних ризиків, пов'язаних із викидами забруднюючих речовин під час виробництва асфальтобетонного дорожнього покриття, та визначення їх значення для забезпечення сталого розвитку території. На основі результатів моделювання розсіювання викидів забруднюючих речовин в атмосферному повітрі визначено рівні неканцерогенного та канцерогенного впливу пріоритетних забруднювачів, серед яких леткі органічні сполуки, бензол та бенз(а)пірен. Встановлено, що сумарний індекс небезпеки розвитку неканцерогенних ефектів для досліджуваних речовин відповідає допустимому рівню, тоді як з урахуванням фонових концентрацій набуває насторожуючого характеру. Комбінований канцерогенний ризик, зумовлений дією бензолу та бенз(а)пірену, визначено як середній, який є прийнятним у виробничих умовах, проте по відношенню до населення потребує регулярного моніторингу та детальнішого аналізу джерел забруднення й потенційних наслідків його дії для обґрунтування необхідних заходів з управління ризиком, ефективності системи екологічного менеджменту та забезпечення сталого розвитку.

**Висновки.** Отримані результати вказують на необхідність подальшого вдосконалення технологічних процесів виробництва асфальтобетонного дорожнього покриття, оптимізації параметрів температурної обробки та впровадження системи інтегрованого моніторингу атмосферного повітря. Обґрунтовано, що систематична оцінка ризиків і контроль викидів є ключовими умовами мінімізації негативного впливу на здоров'я населення й довкілля та сприяють реалізації цілей сталого розвитку.

**Ключові слова:** виробництво, асфальтобетонне дорожнє покриття, атмосферне повітря, оцінювання ризиків, неканцерогенний ризик, канцерогенний ризик, екологічний менеджмент, екологічний контроль, сталий розвиток.

### ***Olha KARAIM***

*Candidate of Economic Sciences, Associate Professor, Associate Professor at the Department of Ecology and Protection of Environment, Lesya Ukrainka Volyn National University, 13 Voli ave., Lutsk, Volyn region, Ukraine, 43025*

**ORCID:** 0000-0002-1722-4110

### ***Oleksandr BAKARAIIEV***

*Director LLC "VOLYNEKOPROMPROEKT", 7 Hulak Artemovsky str., Lutsk, Volyn region, Ukraine, 43005*

**ORCID:** 0000-0002-6876-2840

### ***Volodymyr KARAIM***

*Postgraduate Student, Lesya Ukrainka Volyn National University, 13 Voli ave., Lutsk, Volyn region, Ukraine, 43025*

**ORCID:** 0000-0003-4053-8019

### ***Zoryana LAVRYNYUK***

*Candidate of Chemical Sciences, Associate Professor, Associate Professor at the Department of Ecology and Protection of Environment, Lesya Ukrainka Volyn National University, 13 Volya ave., Lutsk, Volyn region, Ukraine, 43025*

**ORCID:** 0000-0002-1906-3330

### ***Olena DZHAM***

*Candidate of Chemical Sciences, Associate Professor, Associate Professor at the Department of Ecology and Protection of Environment, Lesya Ukrainka Volyn National University, 13 Voli ave., Lutsk, Volyn region, Ukraine, 43025*

**ORCID:** 0000-0003-2222-3734

**Liudmyla SAVCHUK**

*Candidate of Biological Sciences, Associate Professor, Associate Professor at the Department of Ecology and Environmental Protection, Lesya Ukrainka Volyn National University, 13 Voli ave., Lutsk, Volyn region, Ukraine, 43025*

**ORCID:** 0000-0002-8854-6600

**To cite this article:** Karaim, O., Bakaraiev, O., Karaim, V., Lavrynyuk, Z., Dzham, O., Savchuk, L. (2025). Otsiniuvannia ryzykiv vid vykydiv vyrobnytstva asfaltobetonnoho dorozhnoho pokryttia yak chynnyk zabezpechennia staloho rozvytku [Assessment of Risks from Emissions of Asphalt Concrete Pavement Production as a Factor in Ensuring Sustainable Development]. *Problems of Chemistry and Sustainable Development*, 4, 105–115, doi: <https://doi.org/10.32782/pcsd-2025-4-13>

## ASSESSMENT OF RISKS FROM EMISSIONS OF ASPHALT CONCRETE PAVEMENT PRODUCTION AS A FACTOR IN ENSURING SUSTAINABLE DEVELOPMENT

**Objective.** *The aim of the study is to assess non-carcinogenic and carcinogenic risks associated with emissions from hot-mix asphalt production as a factor contributing to sustainable development.*

**Methods.** *Analytical, computational, experimental, comparative methods, as well as information modeling and forecasting.*

**Results.** *The study evaluates environmental risks related to pollutant emissions generated during hot-mix asphalt production and determines their implications for promoting sustainable territorial development. Based on atmospheric dispersion modelling and subsequent risk calculations, the levels of non-carcinogenic and carcinogenic impacts of priority pollutants—including volatile organic compounds, benzene, and benzo(a)pyrene—were analysed. The results show that the cumulative hazard index for non-carcinogenic effects from the studied pollutants falls within the acceptable range, yet becomes of concern when background concentrations are considered. The combined carcinogenic risk associated with benzene and benzo(a)pyrene is classified as medium, which is acceptable under industrial exposure conditions; however, for the general population it requires continuous monitoring and a more detailed investigation of emission sources and potential health outcomes to substantiate risk-management measures, evaluate the effectiveness of environmental management systems, and ensure progress toward sustainable development.*

**Conclusions.** *The findings highlight the need for further improvement of hot-mix asphalt production technologies, optimisation of thermal processing parameters, and the implementation of integrated atmospheric air monitoring systems. It is substantiated that systematic risk assessment and emission control are essential for minimising adverse impacts on public health and the environment and contribute to achieving sustainable development goals, particularly in terms of ensuring safe working conditions and enhancing the environmental resilience of territories.*

**Keywords:** *production, hot-mix asphalt, ambient air, risk assessment, non-carcinogenic risk, carcinogenic risk, environmental management, environmental control, sustainable development.*

**Актуальність проблеми** зумовлена глобальним переходом суспільства до принципів сталого розвитку, що передбачають зниження антропогенного навантаження, оптимізацію технологічних процесів і впровадження екологічно безпечних рішень у дорожньо-будівельній галузі. Формування екологічно відповідної інфраструктури є важливим чинником підвищення стійкості регіонів та забезпечення здорового середовища проживання населення. У цьому контексті наукове обґрунтування ризиків, пов'язаних із викидами асфальтобетонного дорожнього покриття, набуває особливого значення, адже створює підґрунтя для удосконалення екологічних стандартів, підвищення ефективності природоохоронних заходів та підтримання балансу між інфраструктурним

розвитком і збереженням довкілля. Таким чином, дослідження ризиків, спричинених викидами асфальтобетонного дорожнього покриття, є своєчасним і необхідним для формування сучасної системи екологічного менеджменту та досягнення цілей сталого розвитку як на локальному, так і на національному рівнях.

**Аналіз останніх досліджень і публікацій.** Дослідженню проблем оцінювання ризику від впливу викидів забруднюючих речовин присвячено низку праць українських та зарубіжних вчених. Зокрема, у науковій літературі представлено стратегію мінімізації екологічних ризиків від діяльності промислових підприємств у контексті реалізації принципів сталого розвитку, де узагальнено підходи до зниження техногенного навантаження та вдосконалення системи

корпоративного природоохоронного управління (Вагін, 2025). Питання оцінювання ризиків для здоров'я населення, що проживає в зоні впливу промислових підприємств, розглядаються в роботах, де здійснено комплексний аналіз впливу викидів вуглеграфітового виробництва із застосуванням сучасних методів ідентифікації небезпек та прогнозування наслідків (Іваненко, 2024). У розвитку концепції сталого природокористування важливою є проблема формування систем екологічного менеджменту на рівні підприємств, що дозволяє забезпечити ефективне регулювання впливу виробництв на довкілля та регіональний розвиток (Караїм, 2022).

Дослідження, присвячені контролю впливу забруднюючих речовин при виробництві асфальтобетону, акцентують увагу на необхідності системного екологічного моніторингу, моделювання розсіювання викидів та впровадження технологічних рішень, спрямованих на скорочення викидів поліциклічних ароматичних вуглеводнів та летких органічних сполук (Караїм, 2023). Окремі роботи фіксують ризики, пов'язані із забрудненням атмосферного повітря важкими металами у регіонах з високим техногенним навантаженням, підкреслюючи значення гігієнічних оцінок для формування регіональної політики у сфері охорони здоров'я (Онул, 2024). Питання впливу хімічних речовин на працівників промислових підприємств розкрито і в окремих галузевих дослідженнях, де оцінено ризики для здоров'я працівників машинобудівної промисловості (Шаравара, 2025). Результати цих робіт засвідчують, що оцінювання впливу забруднювачів на виробниче середовище має базуватися на поєднанні інструментальних вимірювань, токсикологічного аналізу та методів інформаційно-математичного моделювання для оцінки ризиків.

У міжнародній практиці також приділяється значна увага дослідженню ризиків, пов'язаних із асфальтобетонним виробництвом. Зокрема, вивчаються викиди поліциклічних ароматичних вуглеводнів і запахів при застосуванні модифікованих гумових сумішей (Chlebnikovas, 2023), аналізуються гострі симптоми впливу випарів асфальту на працівників (Terreg, 2006), а також виявляються подразнювальні ефекти парів і аерозолів бітуму на дихальні шляхи (Raulf-Heimsoth, 2011). Окремий напрям становлять дослідження впровадження низькоемісійних

технологій та інгібіторів утворення асфальтових емісій (Pahlavan, 2023; Wang, 2024). Огляді праці систематизують сучасний стан знань про ризики від асфальтових викидів, існуючі прогалини та напрями подальших досліджень (Mousavi, 2024), підкреслюючи необхідність інтеграції екологічного моделювання, токсикологічного аналізу та оцінки впливу на здоров'я. Питання впливу хімічних речовин на працівників промислових підприємств розкрито в дослідженнях, де оцінено ризики для здоров'я працівників металургійної галузі (Dehghani, 2021; Esmaeili, 2024; Golbaghi, 2021).

Отже, проведені розвідки свідчать, що проблема оцінювання екологічного ризику викидів асфальтобетонного виробництва є комплексною і потребує міждисциплінарного підходу. Існуючі дослідження формують наукове підґрунтя для вдосконалення нормативного забезпечення, впровадження технологічних інновацій та підвищення ефективності екологічного менеджменту на підприємствах дорожньо-будівельної галузі.

**Метою дослідження** є здійснення оцінки неканцерогенного та канцерогенного ризиків від викидів виробництва асфальтобетонного дорожнього покриття як чинника забезпечення сталого розвитку.

**Методологія.** Визначення ризику розвитку неканцерогенних ефектів за комбінованого інгалаційного впливу хімічних речовин проведено на основі розрахунку індексу безпеки НІ відповідно до (Оцінка канцерогенного та неканцерогенного ризику для здоров'я населення від хімічного забруднення атмосферного повітря, 2023; Оцінка ризиків для здоров'я працівників від забруднення повітря робочої зони хімічними речовинами, 2024):

$$NI = \sum_{i=1}^n HQ_i, \quad (1)$$

де,  $n$  – кількість досліджених речовин;  $HQ_i$  – коефіцієнт безпеки, відношення концентрації речовини до нормативу:

$$HQ_i = C_i / ГДК_i. \quad (2)$$

Якщо отримане значення коефіцієнта безпеки для речовини не перевищує 1, імовірність формування у працівника несприятливих критичних наслідків за умов її щоденного надходження є низькою, а вплив вважається

прийнятним. Натомість перевищення цього показника понад одиницю свідчить про поступове зростання ризику появи шкідливих ефектів у людини, яке підвищується відповідно до збільшення величини  $HQ_i$ .

Оцінювання сумарного неканцерогенного ризику викидів асфальтобетонного дорожнього покриття здійснено на основі розрахованих коефіцієнтів та індексу небезпеки. Класифікацію рівнів неканцерогенного ризику представлено в табл. 1.

Розрахунок індивідуального канцерогенного ризику здійснюється за формулою:

$$CR = LADC \times UR, \quad (3)$$

де:  $LADC$  – середня концентрація речовин в атмосферному повітрі за весь період усереднення експозиції,  $\text{мг}/\text{м}^3$ ;  $UR$  – одиничний ризик,  $(\text{мг}/\text{м}^3)^{-1}$ ,

$$UR = SF_i \times 20/70, \quad (4)$$

$SF_i$  – фактор канцерогенного потенціалу сполуки,  $(\text{мг}/(\text{кг} \times \text{добу}))^{-1}$ ,  $SF_{\text{бензол}}$  – 0,027  $(\text{мг}/(\text{кг} \times \text{добу}))^{-1}$ ,  $SF_{\text{бенз(а)пірен}}$  – 3,1  $(\text{мг}/(\text{кг} \times \text{добу}))^{-1}$ .

Канцерогенний ризик за комбінованої дії декількох хімічних сполук розглядають як адитивний і розраховують за формулою:

$$CR_a = \sum_{i=1}^n CR_i, \quad (5)$$

де,  $CR_i$  – канцерогенний ризик  $i$ -тої канцерогенної речовини.

Класифікацію рівнів канцерогенного ризику представлено в табл. 2.

**Виклад основного матеріалу дослідження.** Процеси виробництва асфальтобетонного дорожнього покриття та роботи з його укладання супроводжуються утворенням значної кількості хімічних речовин, серед яких домінують тверді суспендовані частинки недиференційовані за складом та леткі органічні сполуки (Караїм, 2023). Ці забруднювачі справляють потенційно шкідливий вплив передусім на працівників, що перебувають у зоні дії технологічних процесів. Низка досліджень (Tepper, 2006; Raulf-Heimsoth, 2011; Chlebnikovas, 2023; Pahlavan, 2023; Mousavi, 2024; Wang, 2024) демонструють, що у працівників, які регулярно контактують з асфальтовими матеріалами, частіше фіксуються симптоми порушення самопочуття – загальна слабкість, підвищена втомлюваність, зниження апетиту, подразнення слизових оболонок очей, носоглотки та верхніх дихальних шляхів. Вираженість цих проявів істотно вища,

Таблиця 1

### Класифікація рівнів неканцерогенного ризику\*

Коефіцієнт небезпеки розвитку неканцерогенних ефектів $HQ_i$ для окремих сполук	Індекс небезпеки розвитку неканцерогенних ефектів (HI) для групи сполук односпрямованої дії	Рівень ризику
>2	>6	Високий
1,1–3	3,1–6	Насторожуючий
0,11–1,0	1,1–3,0	Допустимий
0,1 і менше	1,0 і менше	Мінімальний (цільовий)

Джерело: (Оцінка канцерогенного та неканцерогенного ризику для здоров'я населення від хімічного забруднення атмосферного повітря, 2023; Оцінка ризиків для здоров'я працівників від забруднення повітря робочої зони хімічними речовинами, 2024).

Таблиця 2

### Класифікацію рівнів канцерогенного ризику\*

Ризик протягом життя	Рівень ризику
>10 <sup>-3</sup>	Високий – не прийнятний для виробничих умов і населення. Необхідно проведення заходів щодо зниження ризику
10 <sup>-3</sup> –10 <sup>-4</sup>	Середній – допустимий для виробничих умов; за впливу на все населення необхідно здійснювати динамічний контроль та поглиблене вивчення джерел і можливих наслідків шкідливої дії для вирішення питання щодо заходів з управління ризиком
10 <sup>-4</sup> –10 <sup>-6</sup>	Низький – допустимий ризик (рівень, на якому, як правило, встановлюють гігієнічні нормативи для населення)
<10 <sup>-6</sup>	Мінімальний – бажана (цільова) величина при проведенні оздоровчих та природоохоронних заходів

\* Джерело: (Оцінка канцерогенного та неканцерогенного ризику для здоров'я населення від хімічного забруднення атмосферного повітря, 2023; Оцінка ризиків для здоров'я працівників від забруднення повітря робочої зони хімічними речовинами, 2024).

ніж у контрольних груп, які не мають контакту з асфальтобетонними сумішами.

Необхідно зазначити, що вагомим чинником впливу асфальтобетонної суміші на здоров'я людей є її температура: підвищення температури обробки супроводжується інтенсивнішим випаровуванням токсичних компонентів, що призводить до більш виражених негативних реакцій працівників. Тверді марки асфальту, що потребують нагрівання до вищих температур, створюють більший ризик порівняно з м'якими сумішами (Terper, 2006).

Цікаво, що зовнішні чинники – погодні умови, інтенсивність транспортного руху чи особливості виконання операцій – не чинять значного впливу на частоту симптомів, що підкреслює: основними детермінантами ризиків є саме технологічні характеристики виробництва.

У ширшому контексті забезпечення сталого розвитку такі результати акцентують на необхідності системного оцінювання ризиків, пов'язаних із викидами асфальтобетонного виробництва. Розуміння рівня токсичного навантаження на працівників і довкілля дозволить формувати ефективні стратегії мінімізації шкідливих впливів, удосконалювати технологічні процеси та впроваджувати більш екологічно зберігаючі рішення.

Визначення рівнів ризиків від викидів забруднюючих речовин при виробництві асфальтобетонного дорожнього покриття здійснено на прикладі асфальтобетонного заводу розташованого в Ківерцівському районі, Волинської області

(географічні координати центрів промислового майданчика: 50°49'52" Пн. ш., 25°28'59" Сх. д.). Об'єкт розташований на земельній ділянці площею 1,6 га поруч із магістральною дорогою, що забезпечує оперативне постачання сировини та доставку готової асфальтобетонної суміші до місць виконання дорожніх робіт із мінімальними витратами на логістику. Територія виробничого майданчика межує: на півночі – з лісовою ділянкою та житловим сектором; на північному сході – з лісовими насадженнями та автомобільною дорогою; на сході – з лісовими масивами та автошляхом; на південному сході – з лісом і дорогою; на півдні – з лісовим масивом, іншим промисловим об'єктом і залізничною колією; на південному заході – з виробничою територією іншого підприємства; на заході – з лісовою зоною та занедбаною промисловою ділянкою; на північному заході – з лісом і житловою забудовою.

Асфальтобетонне виробництво здійснюється з фактичною продуктивністю 30 т/год. До комплексу основних об'єктів та технологічних установок належать: прохідна, побутові та адміністративні приміщення, вагова, трансформаторна підстанція, автостоянка, операторська, мобільна асфальтозмішувальна установка контейнерного типу CSD 1500, теплогенератор, дві бітумні цистерни об'ємом 50 м<sup>3</sup> та 26 м<sup>3</sup>, наземні резервуари для дизельного пального та скрапленого вуглеводневого газу (по 50 м<sup>3</sup> кожен), а також відкриті склади для інертних матеріалів – відсіву та щебеню.

Таблиця 3

**Максимальні концентрації забруднюючих речовин на межі санітарно-захисної зони**

№ з/п	Найменування речовини	Частка ГДК без врахування фону	Максимальна концентрація без врахування фону, мг/м <sup>3</sup>	Частка ГДК з врахуванням фону	Максимальна концентрація з врахуванням фону мг/м <sup>3</sup>
1	Азоту діоксид	0,04	0,008	0,44	0,088
2	Сажа	0,05	0,0075	0,45	0,068
3	Сірки діоксид	0,03	0,015	0,43	0,22
4	Сірководень	0,05	0,0004	0,45	0,0036
5	Вуглецю оксид	0,05	0,25	0,45	2,25
6	Бутан	0,05	10	0,45	90
7	Бензол	0,05	0,075	0,45	0,675
8	Бенз(а)пірен	0,05	$0,5 \cdot 10^{-07}$	0,15	$1,5 \cdot 10^{-07}$
9	Одорант СПМ	0,09	$0,5 \cdot 10^{-5}$	0,49	$2,5 \cdot 10^{-5}$
10	Вуглеводні граничні C <sub>12</sub> –C <sub>19</sub>	0,15	0,15	0,55	0,55
11	Суспенд. тверді частинки недиф. за складом	0,57	0,285	0,97	0,49
12	Пропан	0,05	3,25	0,45	29,25

Сушильний комплекс, що включає сушильний, змішувальний та подрібнювальний агрегати з дизельним пальником, оснащено рукавним фільтром Nomex 400, який забезпечує понад 95 % ефективності очищення повітря. Підприємство працює 210 днів на рік, що відповідає річному фонду робочого часу 1680 годин. Обслуговування технологічного процесу здійснює персонал чисельністю 10 осіб.

$$HQ_{\text{азоту діоксид}} = \frac{0,008}{0,2} = 0,04 < 1$$

$$HQ_{\text{сажа}} = \frac{0,0075}{0,15} = 0,05 < 1$$

$$HQ_{\text{сірки діоксид}} = \frac{0,015}{0,5} = 0,03 < 1$$

$$HQ_{\text{сірководень}} = \frac{0,0004}{0,008} = 0,05 < 1$$

$$HQ_{\text{вуглецю оксид}} = \frac{0,25}{5} = 0,05 < 1$$

$$HQ_{\text{бутан}} = \frac{10}{200} = 0,05 < 1$$

Як бачимо отримані значення коефіцієнта небезпеки для всіх досліджуваних речовини не перевищують 1. Імовірність формування у працівників несприятливих критичних наслідків за умов їх щоденного надходження є низькою, а вплив вважається прийнятним.

Показник індексу небезпеки розвитку неканцерогенних ефектів (НІ) розрахований за формулою (1) для досліджуваних речовин становить 1,1 та, згідно табл. 1, відповідає допустимому рівню ризику. Це свідчить про те, що за умов фактичних концентрацій забруднюючих речовин ризик виникнення несприятливих реакцій організму не перевищує меж, які вважаються прийнятними для здоров'я населення при хронічній дії. Такий результат свідчить про відносну ефективність існуючих технологічних процесів та організаційних заходів щодо контролю викидів.

Показник індексу небезпеки розвитку неканцерогенних ефектів для досліджуваних речовин з урахуванням фону ( $HI_{\phi}$ ) становить 5,24, що відповідає, згідно табл. 1, насторожуючому рівню ризику. Отримане значення вказує, що хоч внесок підприємства є контрольованим, кумулятивний вплив локальних та регіональних джерел забруднення може формувати додаткове навантаження на довкілля і здоров'я

Розрахунок концентрацій забруднюючих речовин в атмосферному повітрі виконувався програмним комплексом ЕОЛ+. Максимальні концентрації забруднюючих речовин без врахування фону та сумарні з фоном визначені на межі санітарно-захисної зони наведено в табл. 3.

Визначення коефіцієнта небезпеки  $HQ_i$ , для всіх забруднюючих речовин здійснено за формулою (2).

$$HQ_{\text{бензол}} = \frac{0,075}{1,5} = 0,05 < 1$$

$$HQ_{\text{бенз(a)пірен}} = \frac{0,00000005}{0,000001} = 0,05 < 1$$

$$HQ_{\text{одорант СПМ}} = \frac{0,0000045}{0,00005} = 0,09 < 1$$

$$HQ_{\text{вуглеводні}} = \frac{0,15}{1} = 0,15 < 1$$

$$HQ_{\text{тверді}} = \frac{0,285}{0,5} = 0,57 < 1$$

$$HQ_{\text{пропан}} = \frac{3,25}{65} = 0,05 < 1$$

населення. Це підкреслює важливість комплексного підходу до оцінки якості повітря, який враховує синергетичну дію усіх джерел забруднення, а не лише окремих підприємств. Такий підхід є ключовим для систем управління екологічним станом територій, що орієнтовані на принципи сталого розвитку.

Для визначення канцерогенного ризику, розраховуємо одиничний ризик UR,  $(\text{мг}/\text{м}^3)^{-1}$  для бензолу та бенз(а)пірену за формулою (4),  $UR_{\text{бензол}} = 0,0077$ ;  $UR_{\text{бенз(a)пірен}} = 0,8857$ .

Індивідуальний канцерогенний ризик для бензолу та бенз(а)пірену визначено за формулою (3),  $CR_{\text{бензол}} = 5,8 \times 10^{-4}$ ;  $CR_{\text{бенз(a)пірен}} = 4,4 \times 10^{-8}$ .

Канцерогенний ризик за комбінованої дії бензолу та бенз(а)пірену розраховано за формулою (5),  $CR_a = 5,8 \times 10^{-4}$ .

Отже, рівень канцерогенного ризику комбінованої дії бензолу та бенз(а)пірену, відповідно до табл. 2, визначається як середній, прийнятний для виробничих умов, але не прийнятний для населення. Така ситуація вказує на необхідність поглибленого аналізу джерел утворення канцерогенів і всебічної оцінки можливих довгострокових наслідків для здоров'я населення та стану довкілля. У контексті забезпечення сталого розвитку підприємство має впроваджувати

заходи екологічного менеджменту, спрямовані не лише на дотримання регламентованих норм, а й на мінімізацію ризиків шляхом модернізації технологічних процесів та підвищення екологічної ефективності виробництва. Одним із ключових напрямів є оптимізація температурного режиму під час приготування асфальтобетонних сумішей, зокрема перехід на технології теплих асфальтобетонів, які дозволяють зменшити температуру виробництва на 20–40 °C і, відповідно, скоротити інтенсивність утворення бензолу, поліциклічних ароматичних вуглеводнів та інших токсичних компонентів. Важливим завданням також є модернізація газоочисних систем через установлення вискоелективних фільтрів і локальних відсмоктувачів у зонах найбільшого виділення забруднюючих речовин, що забезпечить зниження їх вмісту у приземному шарі атмосфери. Додаткове зменшення ризиків може бути досягнуто шляхом переходу на менш токсичні види палива, удосконалення процесів згоряння, технічного обслуговування пальникового обладнання та контролю за якістю сировини. З огляду на те, що середній канцерогенний ризик є неприйнятним для населення, підприємству рекомендовано створити буферні зелені насадження, де це доцільно, та реалізувати заходи зі зниження викидів під час транспортування та зберігання матеріалів. Необхідним є впровадження динамічного моніторингу якості атмосферного повітря із застосуванням автоматизованих станцій та регулярним вимірюванням концентрацій пріоритетних канцерогенів, а також проведення планових інвентаризацій викидів із визначенням найбільш небезпечних технологічних ділянок. Удосконалення умов праці персоналу через використання засобів індивідуального захисту, поліпшення вентиляції та ротацію працівників сприятиме зниженню індивідуального впливу канцерогенних речовин. Комплексне впровадження зазначених заходів дозволить підприємству не лише зменшити рівень канцерогенних ризиків до прийнятних значень, але й підвищити екологічну відповідальність, сприяти поліпшенню якості атмосферного повітря та забезпечити відповідність стратегічним цілям сталого розвитку.

З позицій забезпечення сталого розвитку отримані результати мають важливе практичне значення. По-перше, вони свідчать про

необхідність подальшої оптимізації технологічних процесів виробництва асфальтобетонного дорожнього покриття з метою мінімізації викидів твердих суспендованих частиннок недеференційованих за складом, летких органічних сполук та продуктів неповного згоряння. По-друге, наявність насторожуючого рівня неканцерогенного ризику з урахуванням фону вказує на потребу інтегрованого екологічного моніторингу на рівні громади та регіону. По-третє, встановлений середній рівень канцерогенного ризику, який є прийнятним для виробничих умов, але неприйнятним для населення, вимагає реалізації цілеспрямованих технічних і організаційних заходів зі зниження утворення та поширення пріоритетних канцерогенів. Своєчасне реагування на зазначені виклики сприятимуть формуванню більш безпечного виробничого середовища, зменшенню антропогенного навантаження на атмосферне повітря та забезпеченню досягнення стратегічних орієнтирів сталого розвитку, зокрема ЦСР 3 «Міцне здоров'я і благополуччя» та ЦСР 11 «Сталий розвиток міст і громад».

**Висновки та перспективи подальших досліджень.** Таким чином, проведений аналіз дозволяє не лише кількісно оцінити ступінь впливу виробництва асфальтобетонного дорожнього покриття на довкілля та здоров'я населення, але й окреслити ключові напрями підвищення екологічної безпеки та ефективності управління ризиками. Отримані результати підтверджують важливість систематичного моніторингу атмосферного повітря та регулярної інвентаризації викидів, що є необхідними для своєчасного виявлення тенденцій зміни рівнів забруднення та оперативного коригування технологічних процесів. Встановлення середнього рівня канцерогенного ризику та насторожуючих значень неканцерогенних ризиків із урахуванням фону свідчить про потребу поглибленого аналізу джерел утворення небезпечних речовин, оптимізації температурних режимів, удосконалення газоочисних систем і впровадження сучасних екологічно орієнтованих технологій.

Важливою складовою подальшого удосконалення є модернізація систем екологічного менеджменту підприємства на основі принципів адаптивного управління, що передбачає реагування на зміну екологічних умов та підвищення прозорості екологічної інформації.

Розвиток інтегрованих підходів до екологічного контролю на рівні громади та регіону забезпечить підвищення ефективності регіонального планування, сприятиме формуванню збалансованої просторової політики та зменшенню антропогенних навантажень на довкілля.

Забезпечення низьких рівнів екологічних ризиків і підтримання прийняттого екологічного стану становить фундамент для сталого функціонування підприємств з виробництва

асфальтобетонного дорожнього покриття. Комплексне впровадження рекомендованих технічних, організаційних і моніторингових заходів сприятиме створенню екологічно безпечного життєвого середовища, підвищенню стійкості територій до забруднення, а також реалізації ключових цілей сталого розвитку, зокрема тих, що стосуються здоров'я населення, якості повітря, безпеки виробничих процесів і формування екологічно відповідального виробництва.

#### ЛІТЕРАТУРА:

1. Вагін А. В., Іваненко О. І., Панов Є. М., Іванюта С. П., Мартинюк А. С. Стратегія мінімізації екологічних ризиків від ПрАТ «Укрграфіт» в контексті сталого розвитку. *Вісник НТУУ «КПІ імені Ігоря Сікорського». Серія: Хімічна інженерія, екологія та ресурсозбереження*. 2025. № 2. С. 70–82. URL: <https://chemengine.kpi.ua/article/view/333976/322870>
2. Державні медико-санітарні нормативи допустимого вмісту хімічних і біологічних речовин в атмосферному повітрі населених місць : Наказ МОЗ України від 10.05.2024 № 813. Київ, 2024. URL: <https://zakon.rada.gov.ua/laws/show/z0763-24#Text>
3. Державні медико-санітарні нормативи допустимого вмісту хімічних речовин у повітрі робочої зони : Наказ МОЗ України від 09.07.2024 № 1192. Київ, 2024. URL: <https://zakon.rada.gov.ua/laws/show/z1107-24#Text>
4. Іваненко О. І., Панов Є. М., Вагін А. В., Терещенко О. М., Довголап С. Д. Оцінка ризиків для здоров'я населення в зоні впливу викидів забруднюючих речовин підприємств вуглеграфітового виробництва. *Вісник НТУУ «КПІ ім. Ігоря Сікорського». Серія «Хімічна інженерія, екологія та ресурсозбереження»*. 2024. № 2 (23). С. 33–46. URL: <https://ela.kpi.ua/handle/123456789/70792>
5. Караїм О. А., Милько І. П., Караїм В. П. Формування системи екологічного менеджменту підприємств в аспекті відновлення сталого розвитку регіонів. *Наукові праці ДонНТУ. Серія: «Економічна»*. 2022. № 2 (26). С. 29–38. DOI: [http://doi.org/10.31474/1680-0044-2022-2\(26\)-29-38](http://doi.org/10.31474/1680-0044-2022-2(26)-29-38)
6. Караїм О. А., Цьось О. О., Бакараєв О. О., Бедункова О. О., Караїм В. П., Хомацький В. М. Екологічний контроль впливу на довкілля викидів забруднюючих речовин при виробництві асфальтобетону. *Вісник НУВГП. Сільськогосподарські науки : зб. наук. праць*. Рівне, 2023. Вип. 3 (103). С. 97–115. DOI: <https://doi.org/10.31713/vs320237>
7. Онул Н. М., Юнтунен Г. М., Шевченко О. А., Вальчук С. І. Ризик для здоров'я населення Дніпропетровської області від забруднення атмосферного повітря важкими металами. *Intermedical journal*. 2024. № 1. С. 155–159. DOI: <https://doi.org/10.32782/2786-7684/2024-1-24>
8. Оцінка канцерогенного та неканцерогенного ризику для здоров'я населення від хімічного забруднення атмосферного повітря : Метод. рек. від. 18.10.2023 № 1811. МОЗ України. URL: <https://zakon.rada.gov.ua/rada/show/v1811282-23#Text>
9. Оцінка ризиків для здоров'я працівників від забруднення повітря робочої зони хімічними речовинами : Метод. рек. від 02.03.2024 № 358 / Міністерство охорони здоров'я України. Київ, 2024. 33 с. URL: <https://zakon.rada.gov.ua/rada/show/v0358282-24#Text>
10. Шаравара Л. П. Оцінка неканцерогенних ризиків від впливу хімічних речовин у працівників машинобудівного підприємства. *Перспективи та інновації науки. Педагогіка. Психологія. Медицина*. 2025. № 5. С. 3260–3270. DOI: [https://doi.org/10.52058/2786-4952-2025-5\(51\)-3260-3270](https://doi.org/10.52058/2786-4952-2025-5(51)-3260-3270)
11. Chlebnikova A., Marčiulaitienė E., Šernas O., Škuldeckė J., Januševičius T. Research on air pollutants and odour emissions from paving hot-mix asphalt with end-of-life tyre rubber. *Environment International*. 2023. Vol. 181. Article 108281. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.envint.2023.108281>
12. Dehghani F., Omid F., Fallahzadeh R. A., Pourhassan B. Health risk assessment of occupational exposure to heavy metals in a steel casting unit of a steelmaking plant using Monte–Carlo simulation technique. *Toxicology and Industrial Health*. 2021. Vol. 37, № 7. P. 431–440. DOI: <https://doi.org/10.1177/07482337211019593>
13. Esmaili R., Ebrahimpour K., Esmaili S. V., Karimi A., Kamranifar M., Pour M. N. et al. Chemical Health Risk Assessment of Exposure to Metal Fumes among Employed Workers in a Metal Manufactory with an Electric Arc Furnace. *International Journal of Environmental Health Engineering*. 2024. Vol. 13, № 5. Article 18. DOI: [https://doi.org/10.4103/ijehe.ijehe\\_52\\_23](https://doi.org/10.4103/ijehe.ijehe_52_23)

14. Golbaghi A., Nematpour L., Damiri Z., Dehaghi B. F. Carcinogenic and non-carcinogenic health risk assessment of air pollutant in a steel industry. *P J M H S*. 2021. Vol. 15, № 7. P. 1950–1955. DOI: <https://doi.org/10.53350/pjmhs211571950>
15. Mousavi M., Emrani J., Teleha J. C., Jiang G., Johnson B. D., Shamshiripour A., Fini E. H. Health risks of asphalt emission: State-of-the-art, advances and research gaps. *Journal of Hazardous Materials*. 2024. Vol. 480. Article 136048. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2024.136048>
16. Pahlavan F., Gholipour A., Zhou T., Fini E. H. Cleaner asphalt production by suppressing emissions using phenolic compounds. *ACS Sustainable Chemistry & Engineering*. 2023. Vol. 11(7). P. 2737–2751. DOI: <https://doi.org/10.1021/acssuschemeng.2c05345>
17. Raulf-Heimsoth M., Pesch B., Kendzia B., Spickenheuer A., Bramer R., Marczynski B., Brüning T. Irritative effects of vapours and aerosols of bitumen on the airways assessed by non-invasive methods. *Archives of toxicology*. 2011. Vol. 85. P. 41–52. DOI: <https://doi.org/10.1007/s00204-011-0681-6>
18. Tepper, A. L., Burr, G. A., Feng, H. A., Singal, M., Miller, A. K., Hanley, K. W., Olsen, L. D. Acute symptoms associated with asphalt fume exposure among road pavers. *American journal of industrial medicine*. 2006. Vol. 49(9). P. 728–739. DOI: <https://doi.org/10.1002/ajim.20346>
19. Wang Z., Li H., Jia M., Du Q. Emission risk and inhibition technology of asphalt fume from crumb rubber modified asphalt. *Sustainability*. 2024. Vol. 16(20). Article 8840. DOI: <https://doi.org/10.3390/su16208840>

#### REFERENCES:

1. Vahin, A. V., Ivanenko, O. I., Panov, Ye. M., Ivaniuta, S. P., & Martyniuk, A. S. (2025). Stratehiia minimizatsii ekolohichnykh ryzykiv vid PrAT «Ukrhafit» v konteksti staloho rozvytku [Strategy for minimizing environmental risks from PJSC “Ukrhrafit” in the context of sustainable development]. *Visnyk NTUU “KPI imeni Ihoria Sikorskoho”. Seriya: Khimichna inzheneriia, ekolohiia ta resursozberezhennia*, (2), 70–82. <https://chemengine.kpi.ua/article/view/333976/322870> [in Ukrainian].
2. Derzhavni medyko-sanitarni normatyvy dopustymoho vmistu khimichnykh i biolohichnykh rehovyn v atmosfernomu povitri naselennykh mist: Nakaz MOZ Ukrainy vid 10.05.2024 № 813 [State sanitary norms of permissible content of chemical and biological substances in the atmospheric air of settlements: Order of the Ministry of Health of Ukraine No. 813 of May 10, 2024]. (2024). Kyiv. Retrieved from <https://zakon.rada.gov.ua/laws/show/z0763-24#Text> [in Ukrainian].
3. Derzhavni medyko-sanitarni normatyvy dopustymoho vmistu khimichnykh rehovyn u povitri robochoi zony: Nakaz MOZ Ukrainy vid 09.07.2024 № 1192 [State sanitary norms of permissible content of chemical substances in the air of the working zone: Order of the Ministry of Health of Ukraine No. 1192 of July 9, 2024]. (2024). Kyiv. Retrieved from <https://zakon.rada.gov.ua/laws/show/z1107-24#Text> [in Ukrainian].
4. Ivanenko, O. I., Panov, Ye. M., Vahin, A. V., Tereshchenko, O. M., & Dovholap, S. D. (2024). Otsinka ryzykiv dlia zdorovia naseleння v zoni vplyvu vykydiv zabrudniuiuchykh rehovyn pidpriemstv vuhlehratitovoho vyrobnytstva [Assessment of health risks for the population in the zone of emissions impact from carbon-graphite enterprises]. *Visnyk NTUU «KPI im. Ihoria Sikorskoho». Seriya “Khimichna inzheneriia, ekolohiia ta resursozberezhennia”*, 2(23), 33–46. Retrieved from <https://ela.kpi.ua/handle/123456789/70792> [in Ukrainian].
5. Karaim, O. A., Mylko, I. P., & Karaim, V. P. (2022). Formuvannia systemy ekolohichnoho menedzhmentu pidpriemstv v aspekti vidnovlennia staloho rozvytku rehioniv [Formation of an environmental management system for enterprises in the context of restoring sustainable regional development]. *Naukovi pratsi DonNTU. Seriya: “Ekonomichna”*, 2(26), 29–38. [http://doi.org/10.31474/1680-0044-2022-2\(26\)-29-38](http://doi.org/10.31474/1680-0044-2022-2(26)-29-38) [in Ukrainian].
6. Karaim, O. A., Tsos, O. O., Bakaraiev, O. O., Biedunkova, O. O., Karaim, V. P., & Khomatskyi, V. M. (2023). Ekolohichni kontrol vplyvu na dovkillia vykydiv zabrudniuiuchykh rehovyn pry vyrobnytstvi asfaltobetonu [Environmental control of the impact on the environment of pollutant emissions during asphalt concrete production]. *Visnyk NUVHP. Silskohospodarski nauky*, 3(103), 97–115. <https://doi.org/10.31713/vs320237> [in Ukrainian].
7. Onul, N. M., Yuntunen, H. M., Shevchenko, O. A., & Valchuk, S. I. (2024). Ryzyk dlia zdorovia naseleння Dnipropetrovskoi oblasti vid zabrudnennia atmosfernoho povitria vazhkymy metalamy [Health risk to the population of Dnipropetrovsk region from atmospheric air pollution by heavy metals]. *Intermedical Journal*, (1), 155–159. <https://doi.org/10.32782/2786-7684/2024-1-24> [in Ukrainian].
8. Otsinka kantserohennoho ta nekantserohennoho ryzyku dlia zdorovia naseleння vid khimichnoho zabrudnennia atmosfernoho povitria: Metod. rek. vid 18.10.2023 № 1811 / MOZ Ukrainy [Assessment of carcinogenic and non-carcinogenic risk to public health from chemical air pollution: Guidelines No. 1811 of October 18, 2023]. (2023). Retrieved from <https://zakon.rada.gov.ua/rada/show/v1811282-23#Text> [in Ukrainian].
9. Otsinka ryzykiv dlia zdorovia pratsivnykiv vid zabrudnennia povitria robochoi zony khimichnymy rehovynamy: Metod. rek. vid 02.03.2024 № 358 / MOZ Ukrainy [Assessment of workers’ health risks from chemical pollution

of the working air: Guidelines No. 358 of March 2, 2024]. (2024). Kyiv, 33 p. <https://zakon.rada.gov.ua/rada/show/v0358282-24#Text> [in Ukrainian].

10. Sharavara, L. P. (2025). Otsinka nekantserohennykh ryzykiv vid vplyvu khimichnykh rehovyn u pratsivnykiv mashynobudivnoho pidpriemstva [Assessment of non-carcinogenic risks from chemical exposure among workers at a machine-building enterprise]. *Perspektyvy ta innovatsii nauky. Pedahohika. Psykholohiia. Medytsyna*, (5), 3260–3270. [https://doi.org/10.52058/2786-4952-2025-5\(51\)-3260-3270](https://doi.org/10.52058/2786-4952-2025-5(51)-3260-3270) [in Ukrainian].

11. Chlebnikovas, A., Marčiulaitienė, E., Šernas, O., Škulteckė, J., & Januševičius, T. (2023). Research on air pollutants and odour emissions from paving hot-mix asphalt with end-of-life tyre rubber. *Environment International*, 181, Article 108281. <https://doi.org/10.1016/j.envint.2023.108281>

12. Dehghani, F., Omidi, F., Fallahzadeh, R. A., & Pourhassan, B. (2021). Health risk assessment of occupational exposure to heavy metals in a steel casting unit of a steelmaking plant using Monte–Carlo simulation technique. *Toxicology and Industrial Health*, 37(7), 431–440. <https://doi.org/10.1177/07482337211019593>

13. Esmaili, R., Ebrahimipour, K., Esmaili, S. V., Karimi, A., Kamranifar, M., Pour, M. N., et al. (2024). Chemical health risk assessment of exposure to metal fumes among employed workers in a metal manufactory with an electric arc furnace. *International Journal of Environmental Health Engineering*, 13(5), Article 18. [https://doi.org/10.4103/ijehe.ijehe\\_52\\_23](https://doi.org/10.4103/ijehe.ijehe_52_23)

14. Golbaghi, A., Nematpour, L., Damiri, Z., & Dehaghi, B. F. (2021). Carcinogenic and non-carcinogenic health risk assessment of air pollutant in a steel industry. *Pakistan Journal of Medical & Health Sciences*, 15(7), 1950–1955. <https://doi.org/10.53350/pjmhs211571950>

15. Mousavi, M., Emrani, J., Teleha, J. C., Jiang, G., Johnson, B. D., Shamshiripour, A., & Fini, E. H. (2024). Health risks of asphalt emission: State-of-the-art, advances and research gaps. *Journal of Hazardous Materials*, 480, Article 136048. <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2024.136048>

16. Pahlavan, F., Gholipour, A., Zhou, T., & Fini, E. H. (2023). Cleaner asphalt production by suppressing emissions using phenolic compounds. *ACS Sustainable Chemistry & Engineering*, 11(7), 2737–2751. <https://doi.org/10.1021/acssuschemeng.2c05345>

17. Raulf-Heimsoth, M., Pesch, B., Kendzia, B., Spickenheuer, A., Bramer, R., Marczynski, B., & Brüning, T. (2011). Irritative effects of vapours and aerosols of bitumen on the airways assessed by non-invasive methods. *Archives of Toxicology*, 85, 41–52. <https://doi.org/10.1007/s00204-011-0681-6>

18. Tepper, A. L., Burr, G. A., Feng, H. A., Singal, M., Miller, A. K., Hanley, K. W., & Olsen, L. D. (2006). Acute symptoms associated with asphalt fume exposure among road pavers. *American Journal of Industrial Medicine*, 49(9), 728–739. <https://doi.org/10.1002/ajim.20346>

19. Wang, Z., Li, H., Jia, M., & Du, Q. (2024). Emission risk and inhibition technology of asphalt fume from crumb rubber modified asphalt. *Sustainability*, 16(20), 8840. <https://doi.org/10.3390/su16208840>

Стаття надійшла: 12.11.2025

Прийнято: 03.12.2025

Опубліковано: 30.12.2025

УДК 630\*18:502.211(477)

DOI <https://doi.org/10.32782/pcsd-2025-4-14>

**Ганна КІРЕЙЦЕВА**

доктор технічних наук, доцент, професор кафедри екології та природоохоронних технологій, Державний університет «Житомирська політехніка», вул. Чуднівська, 103, м. Житомир, Україна, 10005

**ORCID:** 0000-0002-1055-1784

**Світлана ХОМЕНКО**

аспірантка кафедри екології та природоохоронних технологій, асистентка кафедри екології та природоохоронних технологій, Державний університет «Житомирська політехніка», вул. Чуднівська, 103, м. Житомир, Україна, 10005

**ORCID:** 0009-0002-7463-7867

**Бібліографічний опис статті:** Кірейцева, Г., Хоменко, С. (2025). Адаптація i-Tree Eco для оцінки депонування та секвестрації вуглецю міськими деревними насадженнями промислових зон України. *Проблеми хімії та сталого розвитку*, 4, 116–125, doi: <https://doi.org/10.32782/pcsd-2025-4-14>

## АДАПТАЦІЯ I-TREE ECO ДЛЯ ОЦІНКИ ДЕПОНУВАННЯ ТА СЕКВЕСТРАЦІЇ ВУГЛЕЦЮ МІСЬКИМИ ДЕРЕВНИМИ НАСАДЖЕННЯМИ ПРОМИСЛОВИХ ЗОН УКРАЇНИ

**Мета роботи.** Адаптація програмного забезпечення i-Tree Eco для кількісної оцінки депонування та секвестрації вуглецю міськими деревними насадженнями промислових зон України на прикладі м. Житомира з верифікацією результатів за вітчизняними та міжнародними методиками.

**Методологія.** Інвентаризація 110 дерев 13 видів проводилась у червні-липні 2025 року на 15 кругових пробних ділянках відповідно до Інструкції № 226 із застосуванням обладнання Haglöf (Швеція). Моделювання секвестрації вуглецю виконано за допомогою i-Tree Eco версії 6.0.35. Для верифікації результатів проведено порівняльний аналіз з методикою оцінки фітомаси лісових насаджень та нормативами IPCC.

**Наукова новизна.** Вперше проведено адаптацію i-Tree Eco для оцінки екосистемних послуг міських насаджень промислових зон України з верифікацією за вітчизняною методикою Лакиди та міжнародними стандартами IPCC. На відміну від попередніх українських досліджень, які фокусувалися на паркових насадженнях у сприятливих умовах, дане дослідження охоплює території з високим техногенним навантаженням та встановлює коефіцієнти корекції для основних деревних видів промислових зон.

**Висновки.** Загальний вуглецевий резервуар становить 21,4 т С (78,5 т CO<sub>2</sub>-екв.) при середньому показнику 194,5 кг С/дерево. Валова щорічна секвестрація – 625 кг С/рік (2,29 т CO<sub>2</sub>/рік). Порівняльний аналіз показав середнє відхилення +8,6 % та +12,2 %, що знаходиться в межах допустимої методичної похибки (±10–15 %). Встановлено високу концентрацію вуглецевого запасу у двох видів: акація біла та верба плакуча акумулюють 62,6 % загального запасу при чисельності 27,3 %. Доведено коректність застосування i-Tree Eco для українських умов за дотримання належної ідентифікації видів та точності польових вимірювань. Результати можуть використовуватись для розробки стратегій управління міськими лісами та інтеграції екосистемних послуг у систему вуглецевого обліку України.

**Ключові слова:** секвестрація вуглецю, депонування вуглецю, i-Tree Eco, міські зелені насадження, екосистемні послуги, промислова зона, алометричне моделювання.

**Hanna KIREITSEVA**

Doctor of Technical Sciences, Associate Professor, Professor at the Department of Ecology and Environmental Technologies, Zhytomyr Polytechnic State University, 103 Chudnivska str., Zhytomyr, 10005, Ukraine, [gef\\_kgv@ztu.edu.ua](mailto:gef_kgv@ztu.edu.ua)

**ORCID:** 0000-0002-1055-1784Retry

**Svitlana KHOMENKO**

Postgraduate Student at the Department of Ecology and Environmental Technologies, Assistant at the Department of Ecology and Environmental Technologies, Zhytomyr Polytechnic State University, 103 Chudnivska str., Zhytomyr, 10005, Ukraine, [org\\_hsv@ztu.edu.ua](mailto:org_hsv@ztu.edu.ua)

**ORCID:** 0009-0002-7463-7867

**To cite this article:** Kireitseva, H., Khomenko, S. (2021). Adaptatsiia i-Tree Eco dlia otsinky deponuvannia ta sekvestratsii vuhletsiu miskymy derevnymy nasadzhenniamy promyslovykh zon Ukrainy [Adaptation of i-Tree Eco for assessing carbon storage and sequestration by urban tree stands in industrial zones of Ukraine]. *Problems of Chemistry and Sustainable Development*, 4, 116–125, doi: <https://doi.org/10.32782/pcsd-2025-4-14>

## ADAPTATION OF I-TREE ECO FOR ASSESSING CARBON STORAGE AND SEQUESTRATION BY URBAN TREE STANDS IN INDUSTRIAL ZONES OF UKRAINE

**Aim of the work.** Adaptation of i-Tree Eco software for quantitative assessment of carbon storage and sequestration by urban tree stands in industrial zones of Ukraine using Zhytomyr as a case study, with verification of results using national and international methodologies.

**Methodology.** An inventory of 110 trees representing 13 species was conducted in June–July 2025 across 15 circular sample plots in accordance with Instruction No. 226 using Haglöf equipment (Sweden). Carbon sequestration modeling was performed using i-Tree Eco version 6.0.35. Results were verified through comparative analysis with the forest phytomass assessment methodology and IPCC.

**Scientific novelty.** This is the first adaptation of i-Tree Eco for assessing ecosystem services of urban plantations in Ukrainian industrial zones with verification using Lakyda's national methodology and IPCC international standards. Unlike previous Ukrainian studies that focused on park plantations under favorable conditions, this research covers areas with high technogenic pressure and establishes correction coefficients for major tree species in industrial zones.

**Conclusions.** Total carbon storage amounts to 21.4 t C (78.5 t CO<sub>2</sub>-eq.) with an average of 194.5 kg C per tree. Gross annual sequestration is 625 kg C/year (2.29 t CO<sub>2</sub>/year). Comparative analysis showed average deviations of +8.6 % and +12.2 %, falling within acceptable methodological error (±10–15 %). High concentration of carbon storage was identified in two species: black locust and weeping willow accumulate 62.6 % of total storage while representing only 27.3 % of the population. The validity of i-Tree Eco application for Ukrainian conditions was confirmed when proper species identification and accurate field measurements are maintained. Results can be used for developing urban forest management strategies and integrating ecosystem services into Ukraine's carbon accounting system.

**Keywords:** carbon sequestration, carbon storage, i-Tree Eco, urban tree stands, ecosystem services, industrial zone, allometric modeling.

**Актуальність проблеми.** У контексті глобальних кліматичних змін та виконання зобов'язань за Паризькою угодою та імплементації Європейського зеленого курсу, Україна потребує стандартизованих методів оцінки екосистемних послуг міських зелених насаджень (Moraes et al.; 2024; United Nations, 2018). Міські деревні насадження здатні поглинати атмосферний CO<sub>2</sub> у процесі фотосинтезу та акумулювати його у біомасі протягом десятиліть, що робить їх ключовим інструментом

регулювання вуглецевого балансу урбанізованих територій (Beckett et al., 2002; Nowak et al., 2013). Слід розрізняти депонування вуглецю (carbon storage) – накопичений запас у біомасі (т С), та секвестрацію (carbon sequestration) – щорічне поглинання CO<sub>2</sub> (кгС/рік) (Nowak, Crane, 2002; IPCC, 2019). Кількісна оцінка обох показників є необхідною для інтеграції екосистемних послуг у систему вуглецевого обліку та розробки стратегій управління міським озелененням.

У світовій практиці застосовуються різні підходи до оцінки екосистемних послуг міських насаджень: дистанційні методи на основі LiDAR та супутникових знімків, ГІС-моделювання (CITYgreen, InVEST) та польові методи з алометричним моделюванням (i-Tree Eco) (Doick et al., 2017; Baró et al., 2014; USDA Forest Service, 2020). Однак в Україні досі відсутні науково обґрунтовані методики кількісної оцінки екосистемних послуг міських лісів, що відповідають сучасним міжнародним стандартам. Програмне забезпечення i-Tree Eco, розроблене Лісовою службою США, є визнаним світовим інструментом для інвентаризації та оцінки екосистемних послуг урбанізованих лісів, проте його пряме застосування в українських умовах обмежене відмінностями у видовому складі деревостанів, кліматичних параметрах та специфіці промислового забруднення. Хоча українські науковці (Bidolakh et al., 2023; Bidolakh, Kolesnichenko, 2023; Bondar et al., 2023) вже апробували i-Tree Eco для оцінки екосистемних послуг паркових насаджень, застосування цього інструменту для територій з високим техногенним навантаженням досі не проводилось. Адаптація i-Tree Eco для українських урбофітоценозів дозволить отримати достовірні дані про обсяги депонованого вуглецю та сприятиме виконанню міжнародних кліматичних зобов'язань України.

#### Аналіз останніх досліджень і публікацій.

Для оцінки стану наукових досліджень у цій галузі було проведено бібліометричний аналіз публікацій за період 2020–2025 років у базі даних Scopus за ключовими словами «sequestration, climate change, trees» з використанням

програмного забезпечення VOSviewer версії 1.6.20. Аналіз масиву з 2015 наукових публікацій виявив стійку тенденцію до зростання дослідницького інтересу: кількість публікацій зросла від 187 у 2020 році до 457 у 2025 році. Особливо значущим є стрибок у 2024 році (444 публікації, зростання на 29 % порівняно з 2023 роком), що корелює з посиленням міжнародних зусиль щодо досягнення цілей Паризької угоди (рис. 1).

Аналіз ключових термінів дозволив виявити основні тематичні кластери сучасних досліджень (рис. 2). Центральним поняттям є «carbon sequestration», навколо якого сформовано декілька взаємопов'язаних напрямків: управління лісовими та міськими насадженнями (forest management, urban forestry, reforestation), агролісомеліоративні системи (agroforestry systems) та екосистемні послуги міських територій.

Фундаментальний внесок у розвиток методології оцінки екосистемних послуг міських лісів зробив David J. Nowak, дослідження якого 2002–2013 років встановили базові підходи до квантифікації секвестрації вуглецю міськими деревостанами (Nowak, Crane, 2002; Nowak et al., 2013). Kieron J. Doick та Madalena Vaz Monteiro адаптували методологію i-Tree Eco для європейських міст, провівши оцінку міських лісів у 12 містах Великобританії (Doick et al., 2017). Fredrik Baró та Jaume Terradas продемонстрували практичне застосування i-Tree Eco на прикладі Барселони, оцінивши економічну вартість екосистемних послуг: очищення повітря – \$2,38 млн/рік, секвестрація вуглецю – \$407 тис./рік (Baró et al., 2014).

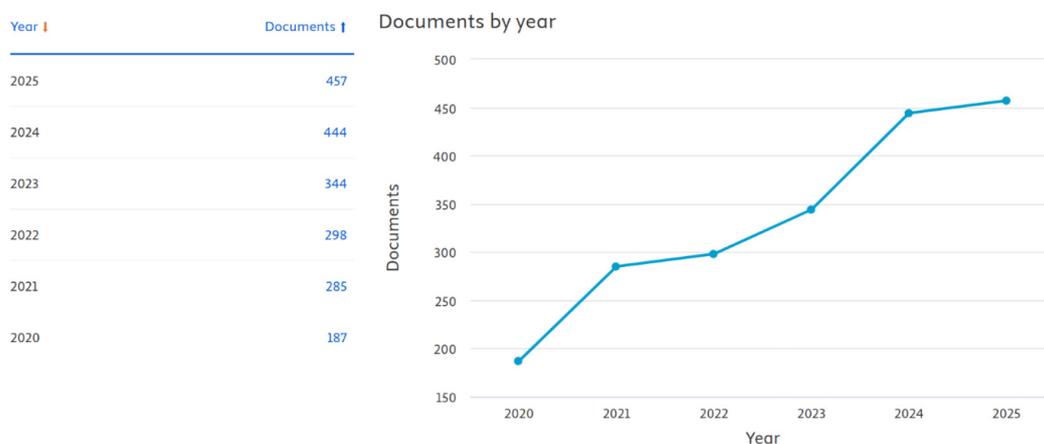
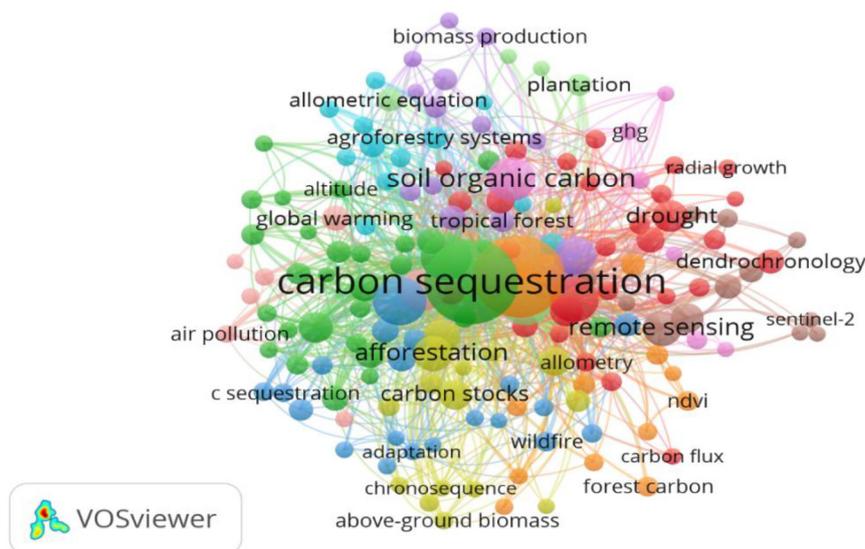


Рис. 1. Динаміка кількості наукових публікацій за ключовими словами «sequestration, climate change, trees» за 2020–2025 роки (база даних Scopus)



**Рис. 2. Кластеризація ключових слів за тематикою «sequestration, climate change, trees» (VOSviewer)**

Серед українських науковців, які використовували цю модель, є О. Бондар, Ю. Мельник, Л. Бициура, О. І. Дух, О. Ярема, Д. Бідолах, П. Лакида, В. Миронюк, Ю. Гайда та С. Підховна (Bidolakh et al., 2023; Bidolakh, Kolesnichenko, 2023; Bondar et al., 2023). Їхні роботи демонструють можливості моделі для аналізу та управління міськими зеленими насадженнями в Україні. Водночас питання секвестрації вуглецю міськими насадженнями промислових зон України, де техногенне навантаження суттєво впливає на продуктивність дерев залишається невивченим.

Отже, бібліометричний аналіз демонструє, що проблематика оцінки секвестрації та депонування вуглецю міськими зеленими насадженнями перебуває у фокусі активних досліджень, що створює методологічне підґрунтя для комплексної оцінки функцій міських деревостанів.

**Мета дослідження:** обґрунтування методичних підходів до адаптації моделі i-Tree Eco для оцінки депонування та секвестрації вуглецю міськими зеленими насадженнями України на прикладі промислової зони м. Житомира.

**Виклад основного матеріалу дослідження.** Для досягнення поставленої мети було обрано програмний комплекс i-Tree Eco (версія 6.0.35). Модель базується на принципах алометричного моделювання, використовуючи емпіричні рівняння, які пов'язують легко вимірювані параметри дерев (діаметр, висота, вік) з їхньою біомасою та здатністю надавати екосистемні послуги. База алометричних рівнянь i-Tree Eco

включає понад 600 видів дерев, у тому числі поширені європейські види.

Дослідження проводилося у червні – липні 2025 року у промисловій зоні м. Житомира, розташованій у північно-східній частині міста. Територія представляє типовий приклад промислової зони середнього українського міста з концентрацією виробничих об'єктів, транспортних магістралей та техногенно порушених ґрунтів. Було закладено 15 кругових пробних у межах трьох стратів: 1) території промислових підприємств (5 ділянок); 2) захисні зелені смуги вздовж транспортних магістралей (5 ділянок); 3) невикористовувані техногенні ділянки (5 ділянок). Ділянки були розподілені по території з урахуванням репрезентативності різних типів міських насаджень: масивні насадження, лінійні придорожні посадки, локальні острівні насадження на територіях СЗЗ підприємств.

Інвентаризація зелених насаджень здійснювалась відповідно до Інструкції з інвентаризації зелених насаджень у населених пунктах України (Наказ Державного комітету будівництва, архітектури та житлової політики України від 24.12.2001 № 226). На кожній пробній ділянці проводився облік дерев з діаметром стовбура  $\geq 5$  см на висоті 1,3 м від кореневої шийки. Виміри здійснювались із використанням обладнання Haglöf (Швеція): діаметр стовбурів вимірювався мірною вилкою Mantax Blue (точність  $\pm 1$  мм), висота дерев – електронним висотоміром Vertex IV (точність  $\pm 0,1$  м), вік модельних дерев визначався за допомогою бура Преслера

через підрахунок річних кілець на кернях деревини. Для кожного дерева фіксувались: вид (за морфологічними ознаками), діаметр на висоті 1,3 м, загальна висота, вік та якісний стан згідно з тричленною шкалою (добрий, задовільний, незадовільний) відповідно до критеріїв Інструкції № 226.

Для верифікації результатів i-Tree Eco було проведено паралельні розрахунки за методикою оцінки фітомаси лісових насаджень (Лакида, 2002) для 10 модельних дерев, які репрезентують основні види та вікові групи. Методика базується на конверсійних коефіцієнтах для перерахунку об'єму стовбурової деревини у загальну надземну біомасу. Об'єм стовбура визначався за формулою (1):

$$V = \pi \times DBH^2 \times H \times f, \quad (1)$$

де  $f$  – видовий коефіцієнт форми стовбура (0,45–0,48 для листяних, 0,42–0,45 для хвойних згідно з довідниками для лісів України).

Таблиця 1

**Видовий склад та репрезентативність  
деревних насаджень промислової зони  
м. Житомира**

№	Назва виду	Кількість, екз.	Частка, %
1	Береза повисла ( <i>Betula pendula</i> Roth)	20	18,2
2	Тополя біла ( <i>Populus alba</i> L.)	15	13,6
3	Верба плакуча ( <i>Salix babylonica</i> )	15	13,6
4	Акація біла ( <i>Robinia pseudoacacia</i> L.)	15	13,6
5	Сосна звичайна ( <i>Pinus sylvestris</i> L.)	10	9,1
6	Клен гостролистий ( <i>Acer platanoides</i> L.)	6	5,5
7	Тополя канадська ( <i>Populus deltoides</i> W.Bartram ex Marshall)	5	4,5
8	Липа дрібнолиста ( <i>Tilia cordata</i> Mill.)	5	4,5
9	Дуб звичайний ( <i>Quercus robur</i> L.)	5	4,5
10	Каштан кінський ( <i>Aesculus hippocastanum</i> L.)	5	4,5
11	Липа широколиста ( <i>Tilia platyphyllos</i> Scop.)	4	3,6
12	Горобина звичайна ( <i>Sorbus aucuparia</i> L.)	3	2,7
13	Бузок звичайний ( <i>Syringa vulgaris</i> L.)	2	1,8
Разом		<b>110</b>	<b>100,0</b>

Загальна надземна біомаса розраховувалась за формулою (2):

$$B = V \times \rho \times BEF, \quad (2)$$

де  $\rho$  – базисна щільність деревини (т/м<sup>3</sup>) за даними Лакиди (2002), BEF – коефіцієнт розширення біомаси.

За результатами інвентаризації на 15 пробних ділянках промислової зони м. Житомира було обліковано 110 дерев. Дендрофлора дослідної території представлена 13 видами деревних рослин, які належать до 11 родів та 8 родин. Таксономічна структура характеризується переважанням покритонасінних (Magnoliophyta) – 109 дерев (99,1 %) над голонасінними (Pinophyta) – 11 дерев (10,0 %). Серед покритонасінних домінує клас Дводольні (Magnoliopsida) з найбільшою представленістю родини Бобові (Fabaceae) – 15 дерев (13,6 %) та Вербові (Salicaceae) – 20 дерев (18,2 %) (табл. 1).

Аналіз видової структури виявив чітке домінування чотирьох видів, які сумарно формують 59,1 % деревостану: береза повисла (*Betula pendula* Roth), тополя біла (*Populus alba* L.), верба плакуча (*Salix babylonica*), акація біла (*Robinia pseudoacacia* L.).

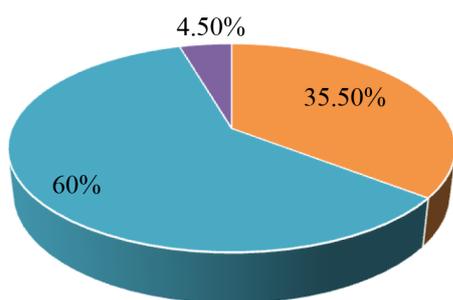
Аналізуючи вікову структуру насаджень варто зазначити, що деревостан промислової зони м. Житомира представлений усіма віковими категоріями (табл. 2).

Середній вік облікованих дерев становить  $40,1 \pm 23,8$  років, що вказує на приблизно нормальний розподіл вікових показників. Молодняки становлять 28,2 %, середньовікові насадження – 26,4 %, пристигаючі – 28,2 %, стиглі та перестійні – 17,2 %. Отже, вікова структура характеризується приблизно рівною представленістю молодняків, середньовікових та пристигаючих насаджень, що є сприятливим для забезпечення безперервності надання екосистемних послуг.

Санітарний стан зелених насаджень є критичним показником їхньої здатності надавати екосистемні послуги, включаючи секвестрацію вуглецю. За результатами візуальної оцінки згідно з Інструкцією № 226, більшість дерев (60,0 %) перебувають у задовільному стані (Fair), що свідчить про помірне ослаблення життєвості внаслідок несприятливих умов промислового середовища (рис. 3).

## Розподіл дерев за віковими групами

Вікова група	Діапазон віку, років	Кількість, екз.	Частка, %	Середній вік, років	Середній DBH, см
Молодняки	5–20	31	28,2	13,5 ± 4,6	6,7 ± 3,4
Середньовікові	21–50 (листяні) 21–60 (хвойні)	29	26,4	30,9 ± 7,1	19,3 ± 14,0
Пристигаючі	41–60 (листяні) 61–80 (хвойні)	31	28,2	53,0 ± 8,7	23,5 ± 16,9
Стигли і перестійні	>60 (листяні) >80 (хвойні)	19	17,2	76,2 ± 13,2	36,7 ± 13,7
Разом	5–100	110	100,0	40,1 ± 23,8	19,9 ± 16,3



- Добрий
- Задовільний
- Незадовільний

**Рис. 3 Розподіл дерев промислової зони м. Житомира за категоріями санітарного стану**

Отже, аналізуючи дані діаграми можна зробити висновок, про те, що загалом 95,5 % дерев перебувають у доброму або задовільному стані, що є важливою передумовою для ефективного надання екосистемних послуг, оскільки у методології i-Tree Eco санітарний стан дерева

безпосередньо впливає на розрахунки через коригувальні коефіцієнти, що враховують зниження фізіологічної активності ослаблених дерев.

Зібрані польові дані імпортувалися в програмний комплекс i-Tree Eco (версія 6.0.35). За результатами моделювання i-Tree Eco v.6.0.35, загальний запас вуглецю, акумульований у надземній та підземній біомасі 110 облікованих дерев промислової зони м. Житомира, становить 21,4 т С (метричних тонн чистого вуглецю), що еквівалентно 78,5 т CO<sub>2</sub>. Середній показник акумуляції вуглецю на одне дерево складає 194,5 кг С (табл. 3). Модель i-Tree Eco розподіляє вуглецевий запас між компонентами: стовбур (50–65 %), гілки (15–25 %), коріння (15–25 %), листя (2–5 %). Стовбур та коріння представляють довгостроковий вуглецевий резервуар з періодом обороту в десятки-сотні років.

## Валовий запас вуглецю у біомасі дерев промислової зони м. Житомира за видами

Вид	Кількість, шт.	Запас С, т	Частка, %	Еквівалент CO <sub>2</sub> , т	Середній запас на дерево, кг С
Акація біла ( <i>Robinia pseudoacacia</i> )	15	6,7	31,5	24,7	446,7
Верба плакуча ( <i>Salix babylonica</i> )	15	6,7	31,3	24,6	446,7
Береза повисла ( <i>Betula pendula</i> )	20	2,6	12,2	9,6	130,0
Сосна звичайна ( <i>Pinus sylvestris</i> )	10	2,3	10,6	8,3	230,0
Тополя біла ( <i>Populus alba</i> )	15	1,2	5,4	4,3	80,0
Дуб звичайний ( <i>Quercus robur</i> )	5	0,8	3,5	2,8	160,0
Каштан кінський ( <i>Aesculus hippocastanum</i> )	5	0,5	2,5	1,9	100,0
Клен гостролистий ( <i>Acer platanoides</i> )	6	0,2	0,7	0,6	33,3
Тополя канадська ( <i>Populus deltoides</i> )	5	0,2	0,9	0,7	40,0
Липа широколиста ( <i>Tilia platyphyllos</i> )	4	0,1	0,7	0,5	25,0
Липа дрібнолиста ( <i>Tilia cordata</i> )	5	0,1	0,4	0,3	20,0
Інші види*	5	0,0	0,2	0,2	4,0
Разом	110	21,4	100,0	78,5	194,5

Примітка: \* Інші види включають Горобина звичайна (*Sorbus aucuparia*) та Бузок звичайний (*Syringa vulgaris*).

Аналізуючи дані таблиці можна зробити висновок, що Акація біла (*Robinia pseudoacacia*) та верба плакуча (*Salix babylonica*) демонструють найвищий середній запас (по 446,7 кг С/дерево) завдяки наявності старовікових екземплярів великого розміру. Зокрема, одна верба віком 60 років з діаметром 104,42 см акумулює 16–19 % від загального запасу деревостану. Сосна звичайна (*Pinus sylvestris*) демонструє середній запас 230 кг С/дерево. Береза повисла (*Betula pendula*), незважаючи на найвищу чисельність (20 екземплярів), має помірний середній запас 130 кг С/дерево через переважання молодих екземплярів, проте її загальний внесок є третім за величиною (2,6 т С, 12,2 %).

Депонований запас 21,4 т С (78,5 т CO<sub>2</sub>) представляє суттєвий внесок у пом'якшення змін клімату. Для порівняння масштабів: цей обсяг еквівалентний річним викидам 17 легкових автомобілів (4,6 т CO<sub>2</sub>/рік), спалюванню 29 т вугілля або 23 т бензину.

Крім валового запасу вуглецю у біомасі дерев була обрахована також валова щорічна секвестрація вуглецю деревостаном (табл. 4).

Аналізуючи дані таблиці можна зробити висновок, що акація біла (*Robinia pseudoacacia*) демонструє найвищу секвестрацію (186 кг С/рік, 29,8 %) завдяки активному росту дерев середнього віку, високій щільності деревини (710 кг/м<sup>3</sup>) та швидким темпам радіального приросту. Береза повисла (*Betula pendula*)

забезпечує другий за величиною внесок (121 кг С/рік, 19,4 %), проте середня секвестрація на дерево є помірною (6,1 кг С/рік) через переважання молодих екземплярів, які потенційно можуть збільшити темпи секвестрації у наступні 10–15 років.

Враховуючи, що алометричні рівняння i-Tree Есо розроблялись для інших кліматичних і екологічних умов, з метою встановлення достовірності результатів в умовах промислової зони України було проведено верифікацію даних шляхом порівняння з розрахунками за вітчизняною методикою Лакиди для репрезентативної вибірки модельних дерев. Додатково було проведено порівняння з узагальненими значеннями IPCC Guidelines (2019) для помірної кліматичної зони Європи. IPCC розробила стандартизовані методи оцінки біомаси та вуглецю для національних інвентаризацій парникових газів, які використовуються понад 190 країнами світу для звітності перед UNFCCC (Рамковою конвенцією ООН про зміну клімату).

Результати порівняльного аналізу представлено в таблиці 5.

Порівняльний аналіз результатів i-Tree Есо з традиційною методикою оцінки фітомаси (Лакида, 2002) для 10 модельних дерев показав середнє відхилення +8,6 %, що знаходиться в межах допустимої методичної похибки алометричних моделей (±10–15 %). Для 80 % досліджених видів (*Betula pendula*, *Robinia pseudoacacia*,

Таблиця 4

**Валова щорічна секвестрація вуглецю деревами промислової зони м. Житомира за видами**

Вид	Кількість, шт.	Секвестрація, кг С/рік	Частка, %	Еквівалент CO <sub>2</sub> , т/рік	Середня секвестрація на дерево, кг С/рік
Акація біла ( <i>Robinia pseudoacacia</i> )	15	186	29,8	0,68	12,4
Верба плакуча ( <i>Salix babylonica</i> )	15	70	11,2	0,26	4,7
Береза повисла ( <i>Betula pendula</i> )	20	121	19,4	0,44	6,1
Сосна звичайна ( <i>Pinus sylvestris</i> )	10	68	10,8	0,25	6,8
Тополя біла ( <i>Populus alba</i> )	15	73	11,6	0,27	4,8
Дуб звичайний ( <i>Quercus robur</i> )	5	32	5,1	0,12	6,4
Каштан кінський ( <i>Aesculus hippocastanum</i> )	5	22	3,5	0,08	4,4
Клен гостролистий ( <i>Acer platanoides</i> )	6	17	2,7	0,06	2,8
Тополя канадська ( <i>Populus deltoides</i> )	5	12	2,0	0,05	2,5
Липа широколиста ( <i>Tilia platyphyllos</i> )	4	11	1,7	0,04	2,6
Липа дрібнолиста ( <i>Tilia cordata</i> )	5	6	1,0	0,02	1,3
Інші види*	5	7	1,1	0,02	1,4
<b>Разом</b>	<b>110</b>	<b>625</b>	<b>100,0</b>	<b>2,29</b>	<b>5,68</b>

Примітка: \* Інші види включають Горобина звичайна (*Sorbus aucuparia*) та Бузок звичайний (*Syringa vulgaris*).

## Порівняльний аналіз оцінок надземної біомаси різними методами

Вид	<i>n</i>	<i>i</i> -Tree Eco (кг С)	Лакида (2002) (кг С)	IPCC (2019) (кг С)	Δ <i>i</i> -Tree/Лакида (%)
<i>Robinia pseudoacacia</i>	15	446,7	412,3	389,1	+8,4
<i>Betula pendula</i>	20	150,5	138,2	144,7	+8,9
<i>Pinus sylvestris</i>	11	230,0	248,5	265,3	-7,5
<i>Populus spp.</i>	18	193,3	175,8	167,2	+9,9
<i>Salix babylonica</i>	2	446,7	401,8	378,6	+11,2
Середнє зважене	110	194,5	179,6	173,4	+8,6

*Populus spp.*, *Salix babylonica*) відхилення не перевищувало  $\pm 10\%$ , що підтверджує біологічну адекватність моделі для масових видів міських насаджень України. Виняток становить *Pinus sylvestris* з відхиленням  $-7,5\%$ , що пояснюється видоспецифічними особливостями архітектури крони європейської сосни порівняно з північноамериканськими аналогами.

Порівняння з узагальненими нормативами IPCC Guidelines (2019) виявило середнє відхилення  $+12,2\%$ , що є методологічно обґрунтованим з огляду на різні цілі застосування: IPCC орієнтована на консервативну оцінку для міжнародної звітності на національному рівні (Tier 1 approach), тоді як *i*-Tree Eco призначена для детальної оцінки локальних міських насаджень з урахуванням видової специфіки, вікової структури та індивідуальних параметрів дерев. Той факт, що результати *i*-Tree Eco знаходяться між оцінками за Лакидою (найближчі) та консервативними значеннями IPCC (найнижчі), свідчить про високий ступінь надійності отриманих даних.

**Висновки і перспективи подальших досліджень.** Проведене дослідження довело можливість успішної адаптації моделі *i*-Tree Eco для оцінки депонування вуглецю міськими зеленими насадженнями України. Порівняльний аналіз результатів із вітчизняною методикою Лакиди (відхилення  $+8,6\%$ ) та нормативами IPCC Guidelines (відхилення  $+12,2\%$ ) підтвердив біологічну адекватність моделі, оскільки обидва показники знаходяться в межах допустимої методичної похибки алометричних моделей. Для  $80\%$  досліджених видів відхилення не

перевищувало  $\pm 10\%$ , що свідчить про коректність застосування північноамериканських алометричних рівнянь для європейських видів за умови належної ідентифікації та точності польових вимірювань.

Апробація методики на прикладі промислової зони м. Житомира показала, що деревостан із 110 дерев 13 видів акумулює 21,4 т вуглецю (78,5 т CO<sub>2</sub>-еквіваленту) із середнім показником 194,5 кг С на дерево, а щорічна секвестрація становить 625 кг С/рік. Ці показники узгоджуються з міжнародними даними для міських насаджень помірної кліматичної зони та підтверджують значущу роль зелених насаджень промислових територій у регулюванні вуглецевого балансу урбанізованих екосистем.

Виявлена висока концентрація вуглецевого запасу у старовікових екземплярах – акація біла та верба плауча акумулюють 62,6 % загального запасу при чисельності лише 27,3 % – має важливе практичне значення для формування стратегій управління міським озелененням. З точки зору кліматичної політики, пріоритетом має бути максимальне продовження життя існуючих дерев, оскільки видалення одного столітнього екземпляра еквівалентне втраті вуглецевого запасу кількох молодих дерев.

Перспективи подальших досліджень пов'язані з розширенням географії апробації моделі на інші кліматичні зони України, розробкою регіональних поправочних коефіцієнтів для основних видів міських насаджень та створенням національної бази даних екосистемних послуг урбанізованих територій.

**ЛІТЕРАТУРА:**

1. Інструкція з інвентаризації зелених насаджень у населених пунктах України: Наказ Державного комітету будівництва, архітектури та житлової політики України від 24.12.2001 № 226. *Офіційний вісник України*. 2002. № 9. С. 441.
2. Лакида П. І. Фітомаса лісів України: монографія. Тернопіль: Збруч, 2002. 256 с.
3. Національний кадастр антропогенних викидів із джерел та абсорбції поглиначами парникових газів в Україні за 1990–2021 роки. Київ : Міністерство захисту довкілля та природних ресурсів України, 2023. 512 с. URL: <https://mepr.gov.ua/news/38887.html>
4. 68 % of the world population projected to live in urban areas by 2050, says UN. *United Nations, Department of Economic and Social Affairs*. 2018. URL: <https://www.un.org/development/desa/en/news/population/2018-revision-of-world-urbanization-prospects.html> (дата звернення: 15.10.2025).
5. Baró F., Chaparro L., Gómez-Baggethun E., Langemeyer J., Nowak D. J., Terradas J. Contribution of ecosystem services to air quality and climate change mitigation policies: the case of urban forests in Barcelona, Spain. *Ambio*. 2014. Vol. 43, No. 4. P. 466–479. DOI: 10.1007/s13280-014-0507-x
6. Beckett K. P., Freer-Smith P. H., Taylor G. Urban woodlands: their role in reducing the effects of particulate pollution. *Environmental Pollution*. 2002. Vol. 99, No. 3. P. 347–360. DOI: 10.1016/S0269-7491(01)00214-7
7. Bidolakh D., Kolesnichenko O. Assessment of ecosystem functions of public green spaces in the city of Berezhany, Ternopil region. *Scientific Horizons*. 2023. Vol. 26, No. 8. P. 96–106. DOI: 10.48077/scihor8.2023.96
8. Bidolakh D., Lakyda P., Myroniuk V., Hayda Y., Pidkhovna S. Assessment and representation of Urban Trees Ecosystem Services: a case study in Pryzhamkovi park. *Folia Forestalia Polonica, Series A – Forestry*. 2023. Vol. 65, No. 2. P. 104–116. DOI: 10.2478/ffp-2023-0011
9. Bondar O., Melnyk Y., Bytsiura L., Dukh O., Yarema O., Faifura V. Assessment of ecosystem services of green spaces in the T. Shevchenko Park of Culture and Recreation (Kremenets) using the i-Tree Eco. *Ukrainian Journal of Natural Sciences*. 2023. Vol. 3, No. 5. P. 89–100. DOI: 10.32782/naturaljournal.5.2023.12
10. Doick K. J., Vaz Monteiro M., Morison J. I. L., Hutchings T. R. The state of Britain’s urban forests: results from the i-Tree Eco surveys in twelve British cities. *Forestry Commission Research Report*. 2017. 56 p.
11. i-Tree Eco User’s Manual v.6.0 / USDA Forest Service, Northern Research Station. Newtown Square, PA, 2020. 189 p. URL: <https://www.itreetools.org> (дата звернення: 10.11.2025).
12. IPCC. 2019 Refinement to the 2006 IPCC Guidelines for National Greenhouse Gas Inventories. Volume 4: Agriculture, Forestry and Other Land Use / Calvo Buendia E., Tanabe K., Kranjc A., Baasansuren J., Fukuda M., Ngarize S., Osako A., Pyrozhenko Y., Sherman P., Federici S. (eds.). Geneva: IPCC, 2019. URL: <https://www.ipcc-nggip.iges.or.jp/public/2019rf/index.html>
13. Moraes M., Amgarten J., Silva L. T., Santos J. V. Urban Health: An Example of a Health-Sustainable City. *AIMS Public Health*. 2024. Vol. 11, No. 3. P. 739–756. DOI: 10.3934/publichealth.2024050
14. Nowak D. J., Crane D. E. Carbon storage and sequestration by urban trees in the USA. *Environmental Pollution*. 2002. Vol. 116, No. 3. P. 381–389. DOI: 10.1016/S0269-7491(01)00214-7
15. Nowak D. J., Greenfield E. J., Hoehn R. E., Lapoint E. Carbon storage and sequestration by trees in urban and community areas of the United States. *Environmental Pollution*. 2013. Vol. 178. P. 229–236. DOI: 10.1016/j.envpol.2013.03.019
16. Zianis D., Muukkonen P., Mäkipää R., Mencuccini M. Biomass and stem volume equations for tree species in Europe. *Silva Fennica Monographs*. 2005. Vol. 4. 63 p. DOI: 10.14214/sf.sfm4

**REFERENCES:**

1. State Committee for Construction, Architecture and Housing Policy of Ukraine. (2002). Instruktziia z inventaryzatsii zelenykh nasadzhen u naselenykh punktakh Ukrainy [Instruction on inventory of green spaces in settlements of Ukraine]: Order No. 226 dated December 24, 2001. *Ofitsiynyi visnyk Ukrainy* [Official Bulletin of Ukraine], 9, 441. [in Ukrainian].
2. Lakyda, P. I. (2002). *Fitomasa lisiv Ukrainy* [Phytomass of Ukrainian forests]. Zbruch. [in Ukrainian].
3. Ministry of Environmental Protection and Natural Resources of Ukraine. (2023). *Natsionalnyi kadastr antropohennykh vykydiv iz dzherel ta absorbtzii pohlynachamy parnykhovykh haziv v Ukraini za 1990–2021 roky* [National inventory of anthropogenic emissions by sources and removals by sinks of greenhouse gases in Ukraine for 1990–2021]. Retrieved from <https://mepr.gov.ua/news/38887.html> [in Ukrainian].
4. United Nations, Department of Economic and Social Affairs. (2018). *68 % of the world population projected to live in urban areas by 2050*. Retrieved from <https://www.un.org/development/desa/en/news/population/2018-revision-of-world-urbanization-prospects.html>

5. Baró, F., Chaparro, L., Gómez-Baggethun, E., Langemeyer, J., Nowak, D. J., & Terradas, J. (2014). Contribution of ecosystem services to air quality and climate change mitigation policies: The case of urban forests in Barcelona, Spain. *Ambio*, 43(4), 466–479. <https://doi.org/10.1007/s13280-014-0507-x>
6. Beckett, K. P., Freer-Smith, P. H., & Taylor, G. (2002). Urban woodlands: Their role in reducing the effects of particulate pollution. *Environmental Pollution*, 99(3), 347–360. [https://doi.org/10.1016/S0269-7491\(01\)00214-7](https://doi.org/10.1016/S0269-7491(01)00214-7)
7. Bidolakh, D., & Kolesnichenko, O. (2023). Assessment of ecosystem functions of public green spaces in the city of Berezhany, Ternopil region. *Scientific Horizons*, 26(8), 96–106. <https://doi.org/10.48077/scihor8.2023.96>
8. Bidolakh, D., Lakyda, P., Myroniuk, V., Hayda, Y., & Pidkhovna, S. (2023). Assessment and representation of urban trees ecosystem services: A case study in Pryzhamkovi park. *Folia Forestalia Polonica, Series A – Forestry*, 65(2), 104–116. <https://doi.org/10.2478/ffp-2023-0011>
9. Bondar, O., Melnyk, Y., Bytsiura, L., Dukh, O., Yarema, O., & Faifura, V. (2023). Assessment of ecosystem services of green spaces in the T. Shevchenko Park of Culture and Recreation (Kremenets) using the i-Tree Eco. *Ukrainian Journal of Natural Sciences*, 3(5), 89–100. <https://doi.org/10.32782/naturaljournal.5.2023.12>
10. Doick, K. J., Vaz Monteiro, M., Morison, J. I. L., & Hutchings, T. R. (2017). *The state of Britain's urban forests: Results from the i-Tree Eco surveys in twelve British cities*. Forestry Commission Research Report.
11. USDA Forest Service, Northern Research Station. (2020). *i-Tree Eco user's manual v.6.0*. Retrieved from <https://www.itreetools.org>
12. IPCC. (2019). *2019 Refinement to the 2006 IPCC Guidelines for National Greenhouse Gas Inventories. Volume 4: Agriculture, Forestry and Other Land Use* (E. Calvo Buendia, K. Tanabe, A. Kranjc, J. Baasansuren, M. Fukuda, S. Ngarize, A. Osako, Y. Pyrozhenko, P. Shermanau, & S. Federici, Eds.). IPCC. Retrieved from <https://www.ipcc-nggip.iges.or.jp/public/2019rf/index.html>
13. Moraes, M., Amgarten, J., Silva, L. T., & Santos, J. V. (2024). Urban health: An example of a health-sustainable city. *AIMS Public Health*, 11(3), 739–756. <https://doi.org/10.3934/publichealth.2024050>
14. Nowak, D. J., & Crane, D. E. (2002). Carbon storage and sequestration by urban trees in the USA. *Environmental Pollution*, 116(3), 381–389. [https://doi.org/10.1016/S0269-7491\(01\)00214-7](https://doi.org/10.1016/S0269-7491(01)00214-7)
15. Nowak, D. J., Greenfield, E. J., Hoehn, R. E., & Lapoint, E. (2013). Carbon storage and sequestration by trees in urban and community areas of the United States. *Environmental Pollution*, 178, 229–236. <https://doi.org/10.1016/j.envpol.2013.03.019>
16. Zianis, D., Muukkonen, P., Mäkipää, R., & Mencuccini, M. (2005). Biomass and stem volume equations for tree species in Europe. *Silva Fennica Monographs*, 4, 1–63. <https://doi.org/10.14214/sf.sfm4>

Стаття надійшла: 25.11.2025

Прийнято: 10.12.2025

Опубліковано: 30.12.2025

УДК 574(582+591.5+592/599)

DOI <https://doi.org/10.32782/pcsd-2025-4-15>

**Людмила САВЧУК**

кандидат біологічних наук, доцент, доцент кафедри екології та охорони навколишнього середовища, Волинський національний університет імені Лесі Українки, просп. Волі, 13, м. Луцьк, Волинська обл., Україна, 43025

**ORCID:** 0000-0002-8854-6600

**Ольга КАРАЇМ**

кандидат економічних наук, доцент, доцент кафедри екології та охорони навколишнього середовища, Волинський національний університет імені Лесі Українки, просп. Волі, 13, м. Луцьк, Волинська обл., Україна, 43025

**ORCID:** 0000-0002-1722-4110

**Зоряна ЛАВРИНЮК**

кандидат хімічних наук, доцент, доцент кафедри екології та охорони навколишнього середовища, Волинський національний університет імені Лесі Українки, просп. Волі, 13, м. Луцьк, Волинська обл., Україна, 43025

**ORCID:** 0000-0002-1906-3330

**Роман ШУЛИПА**

здобувач II рівня вищої освіти, Волинський національний університет імені Лесі Українки, просп. Волі, 13, м. Луцьк, Волинська обл., Україна, 43025

**Бібліографічний опис статті:** Савчук, Л., Караїм, О., Лавринюк, З., Шулипа, Р. (2025). Біологічне забруднення Звірівського лісництва на прикладі шкідників та захворювань деревних рослин. *Проблеми хімії та сталого розвитку*, 4, 126–130, doi: <https://doi.org/10.32782/pcsd-2025-4-15>

## БІОЛОГІЧНЕ ЗАБРУДНЕННЯ ЗВІРІВСЬКОГО ЛІСНИЦТВА НА ПРИКЛАДІ ШКІДНИКІВ ТА ЗАХВОРЮВАНЬ ДЕРЕВНИХ РОСЛИН

*Шкідники (комахи) та захворювання лісових насаджень – є одними з найнебезпечніших чинників, що негативно впливають на стан та стійкість лісових екосистем. Вони спричиняють ослаблення та загибель дерев, приводячи до деградації лісових масивів.*

*Звірівське лісництво, як частина лісового фонду України, виконує важливу природоохоронну діяльність, однак також зазнає негативного впливу через шкідників, напівпаразитів, неінфекційні та інфекційні захворювання.*

*Метою роботи є дослідження видового складу шкідників, напівпаразитів та хвороб деревних порід у Звірівському лісництві.*

*До основних аспектів дослідження належить аналіз пошкодження лісових насаджень, а також оцінка їх впливу на стан лісових екосистем. Для досягнення поставленої мети було проведено комплексний аналіз, який включає: визначення основних видів шкідників, напівпаразитів та захворювань, що поширені на території Звірівського лісництва та оцінка їх шкідливості; розробку рекомендацій, щодо зменшення пошкодження та загибелі лісових масивів.*

*Дослідження проведено в період 2024–2025 рр. У роботі досліджено та систематизовано видовий склад основних шкідників, напівпаразитів та захворювань деревних порід у Звірівському лісництві. При цьому застосовано сучасні методи моніторингу стану лісових насаджень, на основі яких оцінено пошкодження деревних рослин.*

*Результати дослідження свідчать, що найбільшу шкоду в Звірівському лісництві завдали комахи – жуки-точильники (*Ptinidae* Latreille), верхівковий короїд (*Ips acuminatus*) та ін.*

**Ключові слова:** біологічне забруднення, лісництво, ліс, деревні рослини, шкідники, комахи, напівпаразити, захворювання.

**Liudmyla SAVCHUK**

*Candidate of Biological Sciences, Associate Professor, Associate Professor at the Department of Ecology and Protection of Environment, Lesya Ukrainka Volyn National University, 13 Voli ave., Lutsk, Volyn region, Ukraine, 43025*

**ORCID:** 0000-0002-8854-6600

**Olha KARAIM**

*PhD of Economics, Associate Professor, Associate Professor at the Department of Ecology and Protection of Environment, Lesya Ukrainka Volyn National University, 13 Voli ave., Lutsk, Volyn region, Ukraine, 43025*

**ORCID:** 0000-0002-1722-4110

**Zoryana LAVRYNYUK**

*PhD of Chemistry, Associate Professor, Associate Professor at the Department of Ecology and Protection of Environment, Lesya Ukrainka Volyn National University, 13 Voli ave., Lutsk, Volyn region, Ukraine, 43025*

**ORCID:** 0000-0002-1906-3330

**Roman SHULYPA**

*Higher Education Student, Lesya Ukrainka Volyn National University, 13 Voli ave., Lutsk, Volyn region, Ukraine, 43025*

**To cite this article:** Savchuk, L., Karaim, O., Lavrynyuk, Z., Shulypa, R. (2025). Biologichne zabrudnennia Zvirivskoho lisnytstva na prykladi shkidnykiv ta zakhvoriuvan derevnykh roslyn [Biological contamination of zvirivske forestry: a case study of forest pests and tree diseases]. *Problems of Chemistry and Sustainable Development*, 4, 126–130, doi: <https://doi.org/10.32782/pcsd-2025-4-15>

**BIOLOGICAL CONTAMINATION OF ZVIRIVSKE FORESTRY:  
A CASE STUDY OF FOREST PESTS AND TREE DISEASES**

*Forest pests (insects) and diseases are among the most significant factors negatively affecting the condition and resilience of forest ecosystems. They weaken and damage trees, ultimately leading to forest degradation.*

*Zvirivske Forestry, as part of Ukraine's forest fund, plays an important environmental role; however, it also experiences substantial pressure from insect pests, hemi-parasitic plants, and both infectious and non-infectious diseases.*

*The purpose of this study is to investigate the species composition of pests, hemi-parasites, and diseases affecting woody plants within Zvirivske Forestry. The main research tasks include assessing the extent of forest stand damage and evaluating its impact on forest ecosystem sustainability. To achieve this goal, a comprehensive analysis was conducted, including the identification of key pest species, hemi-parasites, and pathogens present in the forestry, as well as an assessment of their harmfulness and the development of recommendations aimed at reducing forest damage and mortality.*

*The study was carried out during 2024–2025. It systematizes the species diversity of major pests, hemi-parasites, and diseases of woody plants in the Zvirivske Forestry. Modern forest condition monitoring methods were applied to evaluate tree damage.*

*The results indicate that the greatest harm within the forestry was caused by insect pests—particularly powderpost beetles (*Ptinidae* Latreille), the pine shoot beetle (*Ips acuminatus*), among others.*

**Keywords:** biological damage, forestry, forest, woody plants, pests, insects, hemi-parasites, diseases.

**Актуальність проблеми.** Проблема поширення шкідників та захворювань у лісах є небезпечною загрозою для лісових масивів. Пошкодження деревостанів призводить до ослаблення, зниження продуктивності та втрати біорізноманіття.

Розмноження шкідників, поширення захворювань, а також вплив кліматичних змін та антропогенних навантажень спричиняють суттєве погіршення стану лісових насаджень.

Актуальність дослідження зумовлена необхідністю моніторингу стану лісів, своєчасного виявлення небезпечних осередків пошкодження та впровадження ефективних методів захисту. Комплексне вивчення шкідників, напівпаразитів та захворювань лісу дозволяє визначити основні тенденції їх розвитку, що забезпечує розробку дієвих заходів збереження і підвищення стійкості лісових масивів Звіривського лісництва.

**Аналіз останніх досліджень та публікацій.** Екологічні дослідження впливу захворювань та шкідників на стан деревних рослин, та напрямки зменшення даних загроз висвітлено у працях (Савчук, Шулипа, 2024; Савчук, Шулипа, 2025). Моніторинг екологічного стану лісових ресурсів філії «Рафалівське лісове господарство» здійснено (Джам, Дяк, Караїм, Лавринюк, 2024). Еколого-статистичний аналіз лісовідновлювальної діяльності у Волинській області представлено в роботі (Лавринюк, Войцеховський, Гулай, Караїм, Джам, 2024). Особливості ураження насаджень сосни звичайної збудником кореневої губки у Житомирському Поліссі досліджено (Вишневецький, Турко, Швець, Власюк, 2022). Стійкість соснових насаджень до кореневої губки в умовах Полісся висвітлено в праці (Турко, 2023). Однак особливостям моніторингу впливу шкідників та захворювань на лісові масиви у Звірівському лісництві приділено недостатньо уваги.

**Метою дослідження** є аналіз поширення шкідників, напівпаразитів та захворювань дерев у Звірівському лісництві, визначення основних причин їх виникнення та розробка рекомендацій щодо зменшення їхнього негативного впливу.

**Виклад основного матеріалу дослідження.** У Звірівському лісництві дослідження проводилися у межах різних кварталів з метою виявлення ознак пошкодження деревостанів. Отримані дані дозволили здійснити систематизацію шкідників, напівпаразитів та захворювань, що наявні в лісовому господарстві.

У Звірівському лісництві нами виявлено такі види шкідників:

- жуки-точильники (*Ptinidae Latreille*) – пошкоджують деревину в лісах, складах і будівлях, прогризаючи ходи у стовбурах, колодах, дерев'яних конструкціях і виробках. Їхні личинки живляться сухою, або ослабленою деревиною, через що, відбувається руйнування її структури;

- верхівковий короїд (*Ips acuminatus*) – пошкоджує соснові ліси, спричиняючи масову загибель дерев;

- шести зубий короїд (*Ips sexdentatus*) – атакує ослаблені соснові насадження, викликаючи їх всихання;

- непарний шовкопряд (*Lymantria dispar*) – об'їдає листя дуба звичайного (*Quercus robur*),

граба звичайного (*Carpinus betulus*) та інших листяних порід дерев;

- короїд-типограф (*Ips typographus*) – найнебезпечніший шкідник ялини європейської (*Picea abies*). Пошкоджені дерева змінюють забарвлення хвої на червоно-буре, та швидко гинуть;

- шовкопряд-монашка (*Lymantria monacha*) – живиться хвоєю сосни звичайної (*Pinus sylvestris*) та *P. Abies*;

- сосновий пильщик (*Diprion pini*) – живиться *P. sylvestris*.

У лісництві наявний такий напівпаразит, як омела звичайна (*Viscum album*) – не спричиняє певної хвороби, живиться соками дерев, переважно листяних порід, виснажує їх.

А також, присутній ряд неінфекційних захворювань:

- морозобоїни – на стовбурах з'являються тріщини кори, які з часом збільшуються, внаслідок різких перепадів температур, особливо взимку та весною;

- сонячні опіки кори – кора на стовбурі пошкоджується, знебарвлюється, відшаровується, внаслідок перегріву від сонячних променів у зимово-весняний період;

- некроз листя – хвоя, або листя буріє, передчасно опадає, у дерев гальмується ріст, внаслідок тривалої відсутності опадів, високих температур та низької вологості.

Інфекційні захворювання лісу поділяють на:

1. Грибкові:

- біла гниль, яку спричиняє трутовик справжній (*Fomes fomentarius*), що зустрічається на березі повислій (*Betula pendula*) та інших листяних деревних породах, завдаючи шкоди шляхом руйнування деревини з середини;

- коренева гниль, що виникає внаслідок перезволоження ґрунту, та розвитку опенька осіннього (*Armillaria mellea*), який проникає в кореневу систему дерев, та призводить до загибелі;

- гниль стовбурів дерев, внаслідок розвитку гриба чаги (*Inonotus obliquus*);

- іржа сосни звичайної – спричиняється грибами роду *Melampsora*. На хвої та пагонах утворюються жовтогарячі здуття, які з часом набувають рудого забарвлення. Хвороба призводить до ослаблення фотосинтезу, опадання хвої та відмирання гілок;

- шотте сосни – спричиняється грибковим збудником *Lophodermium seditiosum*,

в результаті дії якого, відбувається опадання хвої у насадженнях;

– поперечний рак дуба, причиною якого є гриби роду *Cytospora*, що призводить до відмирання тканин, порушення провідної системи дерев, їх ослаблення, втрати господарської цінності та поступового всихання;

– борошниста дубова роса, що спричиняється *Erysiphe alphitoides*, в результаті дії якого листя вкривається білою плівкою, передчасно опадає, порушується фотосинтез та ріст дерев;

– бура плямистість листків берези – утворюється завдяки дії гриба *Gloeosporium betulinum*. Призводить до передчасного всихання та опадання листя.

## 2. Бактеріальні:

– бактеріальна водянка – спричиняє бактерія *Enterobacter nimipressuralis*. Внаслідок дії якої відбувається виділення рідини через тріщини кори, що призводить до порушення руху води і поживних речовин у стовбурі.

3. Вірусні, захворювання у Звірівському лісництві відсутні.

**Висновки і перспективи подальших досліджень.** На основі проведеного дослідження можна зробити висновок, що шкідники, напівпаразити та захворювання є одними з головних чинників, які негативно впливають на стан лісових екосистем Звірівського лісництва. Їх наявність спричиняє ослаблення деревостанів, порушення процесів росту та втрату господарської цінності. Виявлення даних видів, а також аналіз масштабів їх поширення дозволяють оцінити

рівень загрози для лісових насаджень та визначити необхідні заходи для їх зменшення.

Для покращення стану лісових масивів у Звірівському лісництві проводяться вибіркові й суцільно-санітарні рубки, впроваджуються біологічні методи боротьби зі шкідниками, а також здійснюється постійний моніторинг поширення хвороб деревних порід. Ці дії сприяють збереженню життєздатності лісів і підвищенню їх стійкості до несприятливих природних і антропогенних факторів.

Однак, для досягнення довготривалої екологічної рівноваги, необхідне подальше вдосконалення системи лісозахисних заходів, серед яких ключовими є:

1. Розширення мережі моніторингу стану лісових насаджень, що забезпечить своєчасне виявлення осередків поширення шкідників і захворювань.

2. Підвищення ефективності профілактичних заходів, спрямованих на попередження масового розмноження шкідників та розвитку грибкових інфекцій.

3. Впровадження більшої кількості екологічно безпечних методів захисту лісу з використанням біологічних засобів контролю чисельності шкідників та захворювань.

Перспективними напрямками подальших досліджень є розробка природоохоронних програм управління лісовими екосистемами, покращення методів виявлення загроз та впровадження інноваційних технологій у сфері лісовідновлення та захисту лісів.

## ЛІТЕРАТУРА:

1. Вишневецький А., Турко В., Швець М., Власюк В. Ураження насаджень сосни звичайної збудником кореневої губки у Житомирському Поліссі. *Вісник Малинського фахового коледжу*. 2022. № 1. С. 37–48. URL: <https://visnyk.mltk.co.ua/article/view/292018/285243>
2. Джам О., Дяк Т., Гулай Л., Караїм О., Лавринюк З. Моніторинг екологічного стану лісових ресурсів Філії «Рафалівське лісове господарство» ДП «Ліси України». *Проблеми хімії та сталого розвитку*. 2024. № 4. С. 49–56. DOI: <https://doi.org/10.32782/pcsd-2024-4-7>
3. Дудкін О. В. Оцінка і напрями зменшення загроз біорізноманіття України. Київ : Хімджест, 2003. 255 с.
4. Ємельянов І. Г., Загороднюк І. В., Полуда А. П. Рекомендації щодо оцінки різноманіття біосистем. Київ : НАН України, Ін-т зоології ім. І. І. Шмальгаузена, 2002. 45 с.
5. Звірівське лісомисливське господарство. *Офіційна Facebook-сторінка*. Facebook. URL: <https://www.facebook.com/zvirivlis/> (дата звернення: 15.02.2025).
6. Лавринюк З., Войцеховський І., Гулай Л., Караїм О., Джам О. Еколого-статистичний аналіз лісовідновлювальної діяльності у Волинській області. *Проблеми хімії та сталого розвитку*. 2024. № 2. С. 36–47. DOI: <https://doi.org/10.32782/pcsd-2024-2-5>
7. Савчук Л., Шулипа Р. Екологічна характеристика біорізноманіття філії «Ківерцівське лісове господарство» ДП «Ліси України» (Звірівське лісництво). *Проблеми хімії та сталого розвитку*. 2024. № 2. С. 48–54. DOI: <https://doi.org/10.32782/pcsd-2024-2-6>

8. Савчук Л., Шулипа Р. Моніторинг загибелі деревостанів у Звіривському лісництві. *Проблеми хімії та сталого розвитку*. 2025. № 1. С. 83–87. DOI: <https://doi.org/10.32782/pcsd-2025-1-11>
9. Савчук Л., Шулипа Р. Штучне та природне лісовідновлення у Звіривському лісництві. *Проблеми хімії та сталого розвитку*. 2024. № 4. С. 93–98. DOI: <https://doi.org/10.32782/pcsd-2024-4-12>
10. Турко В. Стійкість соснових насаджень до кореневої губки в умовах Полісся. *German international journal of modern science/deutsche internationale zeitschrift für zeitgenössische wissenschaft*, 2023. 58 с. DOI: <https://doi.org/10.5281/zenodo.8054480>
11. Piri, T., Vainio, E. J., Nuorteva, H., Hantula, J. High Seedling Mortality of Scots Pine Caused by *Heterobasidion annosum* s.s. *Forests*. 2021. Vol. 12(9). Article 1289. DOI: <https://doi.org/10.3390/f12091289>

#### REFERENCES:

1. Vyshnevskiy, A., Turko, V., Shvets, M., & Vlasiuk, V. (2022). Urazhennia nasadzhen sosny zvychainoi zbudnykom korenevoi hubky u Zhytomyrskomu Polissi [Infection of Scots pine stands by the root rot pathogen in the Zhytomyr Polissia]. *Visnyk Malynskoho fakhovoho koledzhu*, 1, 37–48. <https://visnyk.mltk.co.ua/article/view/292018/285243> [in Ukrainian].
2. Dzham, O., Diak, T., Hulai, L., Karaim, O., & Lavryniuk, Z. (2024). Monitorynh ekolohichnoho stanu lisovykh resursiv Filii “Rafalivske lisove gospodarstvo” DP “Lisy Ukrainy” [Monitoring of the ecological state of forest resources of the Rafalivske Forestry Branch of SE “Forests of Ukraine”]. *Problemy khimii ta staloho rozvytku*, 4, 49–56. <https://doi.org/10.32782/pcsd-2024-4-7> [in Ukrainian].
3. Dudkin, O. V. Otsinka i napriamy zmeshennia zahroz bioriznomanittia Ukrainy [Assessment and ways to reduce threats to biodiversity in Ukraine]. Kyiv: Khimdzhest [in Ukrainian].
4. Yemelianov, I. H., Zahorodniuk, I. V., Poluda, A. P. (2002). Rekomendatsii shchodo otsinky riznomsnittia biosystem [Recommendations for assessing biodiversity]. Kyiv. [in Ukrainian].
5. Zvirivske lisomyslyvcke gospodarctvo. Ofitsiina Facebook-storinka. [Zvirivske Forestry and Hunting Range. Official Facebook page]. Retrieved from <https://www.facebook.com/zvirivlis/> [in Ukrainian].
6. Lavryniuk, Z., Voitsekhivskiy, I., Hulai, L., Karaim, O., & Dzham, O. (2024). Ekoloho-statystychnyi analiz lisovidnovliuvainoi diialnosti u Volynskii oblasti [Ecological and statistical analysis of reforestation activities in the Volyn region]. *Problemy khimii ta staloho rozvytku*, 2, 36–47. <https://doi.org/10.32782/pcsd-2024-2-5> [in Ukrainian].
7. Savchuk, L., Shulypa, R. (2024). Ekologichna kharakterystyka bioripnomanittia filii “Kivertsivske lisove gospodarstvo” DP “Lisy Ukrainy” (Zvirivske lisnytstvo) [Ecological characteristics of biodiversity at the Kivertsiv Forestry Branch of the State Enterprise “Forests of Ukraine” (Zviriv Forestry)]. *Problemy khimii ta staloho rozvytku – Issues in chemistry and sustainable development*, 2, 48–54. <https://doi.org/10.32782/pcsd-2024-2-6> [in Ukrainian].
8. Savchuk, L., Shulypa, R. (2025). Monitoryng zagybeli derevostaniv u Zvirivskomu lisnytstvi. [Monitoring of tree stand mortality in the Zviriv Forestry]. *Problemy khimii ta staloho rozvytku – Issues in chemistry and sustainable development*, 1, 83–87. <https://doi.org/10.32782/pcsd-2025-1-11> [in Ukrainian].
9. Savchuk, L., Shulypa, R. (2024). Shtuchne i pryrodne lisovidnovlennnyi u Zvirivskomu lisnytstvi. [Artificial and natural forest restoration in the Zviriv Forestry]. *Problemy khimii ta staloho rozvytku – Issues in chemistry and sustainable development*, 4, 93–98. <https://doi.org/10.32782/pcsd-2024-4-12> [in Ukrainian].
10. Turko, V. (2023). Stiikist' sosnovykh nasadzhen do korenevoi hubky v umovakh Polissia [Resistance of pine stands to root rot in the conditions of Polissia]. *German International Journal of Modern Science*, 58. <https://doi.org/10.5281/zenodo.8054480>
11. Piri, T., Vainio, E. J., Nuorteva, H., Hantula, J. (2021). High Seedling Mortality of Scots Pine Caused by *Heterobasidion annosum* s.s. *Forest*, 12(9), 1289. <https://doi.org/10.3390/f12091289>

Стаття надійшла: 17.11.2025

Прийнято: 05.12.2025

Опубліковано: 30.12.2025

## ОСВІТНІ, ПЕДАГОГІЧНІ НАУКИ. ПРОФЕСІЙНА ОСВІТА

УДК 004.738.5:37.018.43

DOI <https://doi.org/10.32782/pcsd-2025-4-16>

### **Юлія ТРИШЕЧКІНА**

здобувачка вищої освіти кафедри цифрових освітніх технологій, Луцький національний технічний університет, вул. Львівська, 75, м. Луцьк, Волинська обл., Україна, 43018

**ORCID:** 0009-0003-3590-1845

### **Ольга ГУЛАЙ**

доктор педагогічних наук, професор, професор кафедри цифрових освітніх технологій, Луцький національний технічний університет, вул. Львівська, 75, м. Луцьк, Волинська обл., Україна, 43018

**ORCID:** 0000-0002-1120-6165

### **Ольга РЕДЬКО**

кандидат технічних наук, доцент, доцент кафедри цифрових освітніх технологій, Луцький національний технічний університет, вул. Львівська, 75, м. Луцьк, Волинська обл., Україна, 43018

**ORCID:** 0000-0002-3305-6022

**Бібліографічний опис статті:** Трішечкіна, Ю., Гулай, О., Редько, О. (2025). Аналіз ефективності використання платформ Moodle, Google Classroom та Zoom у змішаному навчанні. *Проблеми хімії та сталого розвитку*, 4, 131–138, doi: <https://doi.org/10.32782/pcsd-2025-4-16>

## АНАЛІЗ ЕФЕКТИВНОСТІ ВИКОРИСТАННЯ ПЛАТФОРМ MOODLE, GOOGLE CLASSROOM ТА ZOOM У ЗМІШАНОМУ НАВЧАННІ

У статті здійснено аналіз ефективності використання платформ Moodle, Google Classroom та Zoom у змішаному навчанні у закладах вищої освіти. Важливим акцентом даної роботи є оцінка потенціалу платформ з точки зору інклюзивності, педагогічної доцільності, розвитку цифрових компетентностей викладачів та студентів. Стаття спрямована не лише на виявлення існуючих практик, але й на пропонування рішень для їх удосконалення в умовах цифрової трансформації освіти. Визначено переваги й недоліки кожної з платформ, проаналізовано можливості їх поєднання для створення гнучкого й ефективного навчального середовища. Обґрунтовано роль цифрових інструментів у підвищенні якості освіти, особливо в умовах дистанційного чи гібридного формату. Визначено, що Moodle є потужним середовищем для створення системного курсу з глибоким контролем навчальної діяльності; Google Classroom забезпечує оперативність, гнучкість та доступність управління завданнями й комунікацією; Zoom надає можливість синхронної взаємодії в реальному часі, що є критично важливим для змішаного навчання. Таке інтегроване використання цифрових інструментів значно підвищує гнучкість освітнього процесу, дає змогу адаптувати навчання до індивідуальних потреб студентів, підтримує безперервність навчання навіть за умов надзвичайних обставин, зокрема, обмежень воєнного стану в Україні. Особливу увагу приділено викликам упровадження таких платформ та шляхам їх подолання. Висвітлено перспективи подальших досліджень у напрямі інтеграції ІКТ у сучасну педагогічну практику.

**Ключові слова:** Moodle, Google Classroom, Zoom, цифрові освітні платформи, вища освіта, освітній процес.

**Yulia TRISHECHKINA**

Higher Education Student at the Department of Digital Educational Technologies, Lutsk National Technical University, 75 Lvivska str., Lutsk, Volyn region, Ukraine, 43018

**ORCID:** 0000-0003-2223-4070

**Olha HULAI**

Doctor of Pedagogical Sciences, Professor, Professor at the Department of Digital Educational Technologies, Lutsk National Technical University, 75 Lvivska str., Lutsk, Volyn region, Ukraine, 43018

**ORCID:** 0000-0002-1120-6165

**Olha REDKO**

Candidate of Technical Sciences, Associate Professor, Associate Professor at the Department of Digital Educational Technologies, Lutsk National Technical University, 75 Lvivska str., Lutsk, Volyn region, Ukraine, 43018

**ORCID:** 0000-0002-3305-6022

**To cite this article:** Trishechkina, Yu., Hulai, O., Redko, O. (2021). Analiz efektyvnosti vykorystannia platform Moodle, Google Classroom ta Zoom u zmishanomomu navchanni [Analysis of the effectiveness of the use of Moodle, Google Classroom and Zoom platforms in blended learning]. *Problems of Chemistry and Sustainable Development*, 4, 131–138, doi: <https://doi.org/10.32782/pcsd-2025-4-16>

## ANALYSIS OF THE EFFECTIVENESS OF THE USE OF MOODLE, GOOGLE CLASSROOM AND ZOOM PLATFORMS IN BLENDED LEARNING

*The article analyzes the effectiveness of using the Moodle, Google Classroom and Zoom platforms in blended learning in higher education institutions. An important emphasis of this work is to assess the potential of the platforms in terms of inclusiveness, pedagogical feasibility, and development of digital competencies of teachers and students. The article aims not only to identify existing practices but also to propose solutions for their improvement in the context of the digital transformation of education. The advantages and disadvantages of each platform are identified, and the possibilities of combining them to create a flexible and effective learning environment are analyzed.*

*The role of digital tools in improving the quality of education, especially in a distance or hybrid format, is substantiated. It is determined that Moodle is a powerful environment for creating a systematic course with deep control of learning activities; Google Classroom provides efficiency, flexibility and accessibility of task management and communication; Zoom provides the possibility of synchronous interaction in real time, which is critical for blended learning. This integrated use of digital tools significantly increases the flexibility of the educational process, allows for adaptation of learning to individual student needs, and supports the continuity of learning even in emergency circumstances, including the restrictions of martial law in Ukraine. Special attention is paid to the challenges of implementing such platforms and ways to overcome them. Prospects for further research in the area of ICT integration into modern pedagogical practice are highlighted.*

**Keywords:** Moodle, Google Classroom, Zoom, digital educational platforms, higher education, educational process.

**Актуальність проблеми.** З огляду на розвиток інформаційних технологій та цифровізацію освітнього простору, перед вищими навчальними закладами стоїть завдання не лише адаптації до нових умов, а й переосмислення методології навчального процесу. В цьому контексті змішане навчання розглядається як ефективна стратегія, що поєднує кращі елементи традиційної та дистанційної освіти. Основна перевага змішаного формату полягає у гнучкості та індивідуалізації навчання, що відповідає потребам сучасного студента.

Однак ефективність реалізації змішаного навчання безпосередньо залежить від якості вибраних інструментів та ступеня їх інтеграції в навчальний процес. Moodle, Google Classroom та Zoom пропонують різні функціональні можливості – від керування навчальним контентом і завданнями до організації синхронної взаємодії між учасниками освітнього процесу. Попри це, кожна з платформ має свої обмеження, які можуть як сприяти, так і гальмувати досягнення цілей навчання.

Також варто враховувати рівень цифрової компетентності як викладачів, так і студентів,

що впливає на здатність ефективно використовувати платформи. Успішне впровадження змішаного навчання вимагає відповідної підготовки, методичної підтримки та адаптації освітнього контенту. До цього додаються соціальні й психологічні аспекти навчального процесу, пов'язані з віддаленою взаємодією, зниженням мотивації та труднощами з організацією самостійної роботи студентів. Крім того, актуальність проблеми зумовлена і потребою у науково обґрунтованих підходах до оцінювання ефективності використання конкретних платформ. Попри велику кількість досліджень, які висвітлюють окремі аспекти дистанційної чи змішаної освіти, існує потреба в комплексному аналізі функціоналу, переваг і недоліків Moodle, Google Classroom та Zoom саме в контексті змішаного формату навчання.

Ураховуючи вищезазначене, постає об'єктивна потреба у систематизації наявного досвіду та науковому осмисленні ефективності використання цих платформ. Саме такий аналіз є необхідним кроком до вдосконалення методик змішаного навчання у закладах вищої освіти України.

**Аналіз останніх досліджень та публікацій.** Упродовж останнього десятиліття спостерігається стрімке зростання зацікавленості наукової спільноти до вивчення процесів цифровізації освіти, зокрема у контексті запровадження змішаного навчання в закладах вищої освіти (Гулай, 2022; Трускавецька, 2023). Актуальність цієї тематики особливо зросла під час пандемії COVID-19, коли виникла нагальна потреба в переході на дистанційні та гібридні форми організації освітнього процесу.

Так, Д. В. Гульпа, Г. М. Йордан і Н. В. Лемешева розглядають інноваційні підходи до організації дистанційного навчання як важливий чинник модернізації вищої освіти в Україні. На їхню думку (Гульпа, 2024), використання електронних платформ, зокрема Moodle, дозволяє не лише зберігати безперервність освітнього процесу, але й значно розширює можливості для індивідуалізації та диференціації навчання. Moodle, як зазначають автори, забезпечує зручний інтерфейс для організації курсу, доступ до навчальних матеріалів, систематичний контроль знань та реалізацію інтерактивних форм зворотного зв'язку.

О. П. Коваль, аналізуючи специфіку підготовки майбутніх учителів інформатики, звертає

увагу на те, що змішане навчання вимагає від педагогів нових підходів до організації освітнього середовища. Він підкреслює, що цифрові платформи типу Google Classroom і Zoom мають використовуватись не лише як засоби інформаційного обміну, але й як повноцінні інструменти формування мотивації, розвитку самостійності, критичного мислення та цифрової компетентності (Коваль, 2025). Дослідник також акцентує увагу на необхідності інтеграції цифрових сервісів у навчальний процес не фрагментарно, а системно, із забезпеченням методичної та технічної підтримки для викладачів і студентів.

У свою чергу, О. Кучай та А. Дем'янюк розглядають змішане навчання як форму взаємодії між традиційними та електронними засобами подання матеріалу. Вони вказують, що Moodle, Google Classroom і Zoom мають різну функціональну спрямованість, однак у комплексі здатні забезпечити високу якість навчання за умов їх оптимального поєднання. Науковці наголошують (Кучай, 2021), що Moodle найкраще підходить для створення довготривалих курсів з контролем знань, Google Classroom – для гнучкої організації матеріалів і завдань, а Zoom – для інтерактивного спілкування у режимі реального часу.

Особливу увагу практичному досвіду застосування платформи Moodle приділяють Т. А. Мельник і Г. К. Волчкова. Вони зазначають, що ця система дозволяє формувати змістовно насичене освітнє середовище, яке адаптується до потреб як викладача, так і студента (Мельник, 2021). Moodle має функціонал для створення тестів, лекцій, форумів, опитувань і електронного журналу, що забезпечує високий рівень контролю за навчальним процесом. Авторки також підкреслюють, що успішність використання Moodle значною мірою залежить від компетентності викладача у сфері цифрової педагогіки.

У міжнародних дослідженнях також спостерігається активне вивчення ефективності окремих платформ. Так, G. R. Dantes та співавтори зосереджуються на аналізі Zoom як засобу відеозв'язку у дистанційному навчанні (Dantes, 2022). Вони виділяють ключові переваги цієї платформи: синхронна комунікація, функція запису занять, віртуальні дошки, сесійні зали для групової роботи. Водночас звертається

увага на виклики – зокрема, нестабільне інтернет-з'єднання та обмежений інтерактивний потенціал при пасивному використанні.

Цікаві висновки подають V. L. Dudar та колеги, які розглядають Zoom і Google Classroom як інструменти комплексної цифрової взаємодії (Dudar, 2021). Вони стверджують, що саме інтегроване застосування кількох платформ сприяє збереженню академічної успішності студентів, дозволяє викладачам варіювати методи викладання та оцінювання, а також забезпечує безперервність зворотного зв'язку.

У контексті початкової школи відзначають (Mahendra, 2021) значний позитивний вплив Google Classroom і Zoom на якість навчальних досягнень. Зокрема, зазначається, що регулярне використання цих платформ сприяє розвитку самоорганізації учнів і формує навички відповідального ставлення до навчального процесу.

У дослідженні S.A. Maesaroh і L. Marlana зроблено порівняльний аналіз ефективності платформ Google Classroom та Zoom у викладанні математики. Автори дійшли висновку (Maesaroh, 2022), що одночасне застосування обох платформ значно підвищує результативність навчання, оскільки дозволяє поєднати гнучкість у подачі матеріалу з можливістю живого спілкування та пояснення складних тем.

Також важливими є висновки W. Reviandani, яка досліджує ефективність змішаного навчання з використанням Google Classroom і Zoom у старших класах. Вона підкреслює (Reviandani, 2021), що поєднання асинхронного (через Google Classroom) і синхронного (через Zoom) форматів забезпечує гнучкість, адаптивність та індивідуалізацію навчання, що позитивно впливає на рівень засвоєння матеріалу та залученість учнів.

Таким чином, аналіз наукових джерел свідчить про наявність ґрунтовних досліджень щодо можливостей окремих платформ. Однак варто зазначити, що комплексне вивчення одночасного застосування Moodle, Google Classroom та Zoom у змішаному форматі залишається недостатньо представленим, особливо в контексті українських закладів вищої освіти. Це і визначає актуальність подальшого дослідження у цьому напрямі.

**Мета статті** – всебічне дослідження ефективності використання платформ Moodle, Google Classroom і Zoom у змішаному навчанні, зокрема з точки зору реалізації освітніх цілей,

взаємодії між учасниками процесу, зручності користування, а також впливу на мотивацію та академічні результати студентів. Зважаючи на це, об'єктом дослідження є змішане навчання у закладах вищої освіти, а предметом – функціональні, методичні й організаційні аспекти застосування вказаних платформ.

**Методи дослідження** – системно-структурний аналіз, узагальнення й систематизація наукових ідей та практичних рішень. Важливим акцентом даної роботи є також оцінка потенціалу платформ з точки зору інклюзивності, педагогічної доцільності, розвитку цифрових компетентностей викладачів та студентів. Отже, стаття спрямована не лише на виявлення існуючих практик, але й на пропонування рішень для їх удосконалення в умовах цифрової трансформації освіти. Частина матеріалів цієї статті була підготовлена за допомогою штучного інтелекту (<https://chatgpt.com/g/g-69HnvSsrn-ukrainian-voice>) з метою підвищення якості структурування та формулювання наукового тексту.

**Виклад основного матеріалу.** У сучасній освітній практиці змішане навчання розглядається як одна з найефективніших форм організації навчального процесу, що поєднує в собі переваги традиційного очного та дистанційного форматів. Такий підхід дозволяє гнучко адаптувати навчальні курси до різних умов, забезпечуючи при цьому сталість та якість освіти. Одним з ключових факторів успішної реалізації змішаного навчання є вибір і правильне використання цифрових платформ, які забезпечують освітню взаємодію, комунікацію, збереження й аналіз результатів навчання.

Однією з найпоширеніших платформ у вищій освіті України є Moodle (Modular Object-Oriented Dynamic Learning Environment) – відкритий програмний продукт для створення інтерактивних курсів. Його перевагою є гнучкість налаштування, можливість організації повноцінного освітнього середовища з розширеним інструментарієм для оцінювання, зворотного зв'язку, контролю відвідуваності, індивідуального підходу до навчання. За словами Т. А. Мельник та Г. К. Волчкової, «...використання платформи Moodle у вищій школі забезпечує широкі можливості для диференціації навчального процесу, гнучке управління темпами навчання та створення індивідуальних траєкторій» (Мельник, 2021).

Практика застосування Moodle демонструє високий рівень інтерактивності, особливо за умови використання вбудованих засобів тестування, форумів, опитувань, аналітики успішності (Hulai, 2025). Крім того, Moodle дозволяє викладачу завантажувати навчальні матеріали у різних форматах – текстовому, графічному, відео – що підвищує інформативність та різноманітність викладу. Однак для ефективної роботи з платформою необхідна певна технічна підготовка з боку як викладача, так і студента, а також стабільне інтернет-з'єднання та серверна підтримка закладу освіти. У цьому контексті варто також зазначити, що Moodle є оптимальним вибором для структурованих, тривалих курсів, де передбачено глибоку аналітику навчальної діяльності.

Наступною важливою платформою є Google Classroom – безкоштовний сервіс, інтегрований з іншими інструментами Google Workspace, такими як Google Drive, Google Docs, Google Meet. Простота інтерфейсу, швидкий доступ, зручна система комунікації між учасниками навчального процесу, автоматичне збереження робіт у хмарі – все це робить Google Classroom популярним серед викладачів та студентів. Погоджуємося із твердженням, що Google Classroom має «високий потенціал для підтримки студентів, особливо в технічних спеціальностях, завдяки зручній організації завдань і наданню оперативного зворотного зв'язку» (Maesaroh, 2022).

Google Classroom має низку важливих переваг, зокрема – мінімальну потребу в технічних знаннях при початковому налаштуванні курсу, підтримку мобільних пристроїв, миттєві сповіщення, автоматичну перевірку окремих типів завдань, та легку інтеграцію з іншими платформами. Особливо цінною є можливість організувати спільну роботу студентів у режимі реального часу – наприклад, через редагування одного документа кількома користувачами або коментування презентацій. Це дозволяє створювати середовище активного навчання, спрямованого на співпрацю та взаємне навчання.

Водночас, серед недоліків Google Classroom можна відзначити обмеженість функцій аналітики, відсутність гнучких інструментів для оцінювання за складними шкалами, а також деяку залежність від стабільності сервісів Google. Проте у поєднанні з іншими платформами,

особливо з відеоконференц-зв'язком, як-от Zoom, Google Classroom демонструє високу ефективність у змішаному навчанні, зокрема при реалізації моделі «перевернутого класу».

Платформа Zoom, хоч і не є повноцінним середовищем управління курсами, посідає важливе місце у змішаному навчанні завдяки своїм комунікаційним можливостям. Вона забезпечує відеозв'язок у режимі реального часу, дає змогу організувати лекції, семінари, консультації, дискусії та навіть захисти наукових робіт. Суттєвою перевагою Zoom є наявність функцій демонстрації екрана, роботи в групах (breakout rooms), вбудованого чату, запису сесій і можливості контролю присутності учасників.

Використання Zoom суттєво впливає на рівень залученості студентів до навчального процесу, підвищує рівень комунікації та дає змогу оперативно отримати зворотний зв'язок (Dantes, 2022). Успішність використання Zoom залежить не лише від технічних характеристик, але й від педагогічного дизайну заняття – чітко сформульованих цілей, сценарію, таймінгу, активних методів взаємодії.

Проте Zoom має й певні обмеження, які стають особливо відчутними при інтенсивному або довготривалому використанні: втома від відеозв'язку, складність у підтриманні постійної уваги студентів, технічні збої, потреба в якісному інтернеті. Також обмежена версія без передплати має обмеження у тривалості сеансів (до 40 хвилин), що іноді створює труднощі при проведенні повноцінних занять.

Порівняльний аналіз платформ Moodle, Google Classroom і Zoom (див. табл. 1) дає змогу побачити, що кожна з них має свої унікальні функціональні можливості, які роблять її придатною для виконання певних дидактичних завдань.

На основі наведеного аналізу можна дійти висновку, що жодна з платформ не забезпечує повного спектра функцій для організації змішаного навчання самостійно, але їх комбінація дозволяє компенсувати слабкі сторони однієї платформи за рахунок сильних сторін іншої. Наприклад, платформа Moodle може виступати як основа для організації навчального курсу, де зберігаються всі матеріали, тести, завдання й оцінки. Google Classroom може використовуватись як інструмент для більш гнучкого управління поточною діяльністю та взаємодії

**Порівняльний аналіз інтерактивних платформ для навчання**

Платформа	Переваги	Обмеження
Moodle	Розвинена система оцінювання, тести, форуми, індивідуальні траєкторії	Складніша в адмініструванні, потребує технічної підтримки
Google Classroom	Простота інтерфейсу, інтеграція з Google-сервісами, мобільність	Обмежені можливості аналітики та персоналізації.
Zoom	Онлайн-зустрічі, інтерактивність, групова робота	Високе навантаження, потреба у швидкому інтернеті

у групах, а Zoom – як засіб для проведення синхронних занять і консультацій.

Ефективне поєднання цих платформ може виглядати наступним чином:

Moodle – базова платформа для навчального курсу, де викладач організує всі етапи навчання (модулі, контроль, моніторинг);

Google Classroom – для швидкої взаємодії, розповсюдження поточних завдань, сповіщень, коментарів до робіт;

Zoom – для проведення синхронних занять, обговорень, презентацій та зворотного зв'язку.

Таке інтегроване використання цифрових інструментів значно підвищує гнучкість освітнього процесу, дає змогу адаптувати навчання до індивідуальних потреб студентів, підтримує безперервність навчання навіть за умов надзвичайних обставин.

Однак, для досягнення ефективності в такій моделі необхідна системна підготовка викладачів до роботи з платформами; чітка структура курсу, що враховує особливості кожної з платформ; мотивація студентів до самостійного навчання; інституційна підтримка на рівні вишу (технічна, методична, адміністративна).

Попри численні переваги, впровадження платформ Moodle, Google Classroom та Zoom у змішане навчання супроводжується низкою проблем, які можуть знижувати ефективність освітнього процесу.

Серед основних труднощів можна виокремити наступні.

1. Низький рівень цифрової компетентності викладачів і студентів. Не всі учасники освітнього процесу володіють необхідними навичками для ефективного використання платформ. Особливо це стосується складніших систем, як-от Moodle, де потрібні знання не лише з педагогіки, а й базові ІТ-навички.

2. Нестабільне інтернет-з'єднання. Проблеми з доступом до мережі можуть бути фатальними для проведення занять у Zoom або

завантаження матеріалів у Google Classroom, що особливо актуально для студентів із віддалених регіонів.

3. Надмірне навантаження на викладачів. Поєднання декількох платформ вимагає додаткового часу на планування, технічне супроводження, перевірку завдань та комунікацію, що може призвести до професійного вигорання.

4. Проблеми з мотивацією студентів. Дистанційні форми навчання не завжди сприяють підтриманню дисципліни, самоконтролю та інтересу, що ускладнює досягнення навчальних результатів.

5. Відсутність єдиного стандарту використання платформ. У деяких ЗВО викладачі самостійно обирають інструменти, що призводить до хаотичності, дублювання функцій і труднощів у студентів, які мають справу з кількома різними системами одночасно.

Для подолання цих викликів доцільно вживати наступні заходи:

- проведення систематичних тренінгів і курсів підвищення кваліфікації для викладачів щодо інтеграції цифрових платформ у навчальний процес;

- розробка методичних рекомендацій щодо ефективного поєднання платформ, зокрема з прикладами сценаріїв занять і шаблонами курсів;

- інституційна підтримка на рівні адміністрацій закладів вищої освіти – технічна допомога, розподіл навантаження, мотиваційна підтримка;

- моніторинг та аналітика освітнього процесу із залученням ІКТ для своєчасного виявлення проблем і корекції стратегії навчання;

- залучення студентів до зворотного зв'язку, анкетування щодо зручності платформ та їх впливу на якість засвоєння матеріалу.

Таким чином, правильна організація процесу впровадження платформ у змішане навчання може значно підвищити якість освіти,

за умови врахування не лише технічних аспектів, а й психолого-педагогічних особливостей.

**Висновки і перспективи подальших досліджень.** У ході дослідження було встановлено, що використання цифрових платформ Moodle, Google Classroom та Zoom у змішаному навчанні відкриває широкі можливості для підвищення ефективності освітнього процесу. Кожна з платформ має власну функціональну специфіку, яка дозволяє реалізовувати різні дидактичні завдання – від організації навчального контенту й оцінювання до забезпечення живої комунікації та підтримки студентів.

Визначено, що Moodle є потужним середовищем для створення системного курсу з глибоким контролем навчальної діяльності; Google Classroom забезпечує оперативність, гнучкість та доступність управління завданнями й комунікацією; Zoom надає можливість синхронної взаємодії в реальному часі, що є критично важливим для змішаного навчання. Результати аналізу свідчать, що найбільшої ефективності можна досягти за умови інтеграції цих платформ у єдину освітню модель, орієнтовану на

потреби студентів, можливості викладачів та специфіку навчальних дисциплін.

Водночас дослідження також виявило низку викликів, що потребують вирішення: недостатня цифрова грамотність учасників освітнього процесу, технічні обмеження, перевантаження викладачів та недостатня мотивація студентів. Подолання цих бар'єрів вимагає як методичної, так і організаційної роботи з боку освітніх установ.

Перспективи подальших досліджень полягають у розробці моделей оптимального поєднання цифрових платформ відповідно до типу дисципліни; вивченні впливу змішаного навчання на результати студентів у довготривалій перспективі; формуванні стандартів цифрової компетентності для викладачів; оцінюванні економічної доцільності та ресурсної ефективності впровадження змішаних форматів у ЗВО.

Таким чином, цифрові платформи виступають не лише інструментом адаптації до нових умов, а й потужним чинником трансформації сучасної вищої освіти.

#### ЛІТЕРАТУРА:

1. Гулай О., Кабак В. Цифрові інструменти GOOGLE як засіб удосконалення освітнього процесу в закладах вищої освіти. *Наукові записки Тернопільського національного педагогічного університету імені Володимира Гнатюка*. Серія: Педагогіка, 2022. № 1(2). С. 14–23.
2. Гульпа Д. В., Йордан Г. М., Лемешева Н. В. Інноваційні підходи до організації дистанційного навчання в закладах вищої освіти України. *Педагогічна Академія: наукові записки*. 2024. Вип. 13. <https://doi.org/10.5281/zenodo.14525382>
3. Коваль О. Підготовка майбутніх учителів інформатики до організації освітнього процесу в умовах змішаного навчання. *Український педагогічний журнал*. 2025. Вип. 1. С. 45–59.
4. Кучай О., Дем'янюк А. Сучасні технології дистанційного навчання. *Гуманітарні студії : історія та педагогіка*. 2021. Вип. 2. С. 77–85.
5. Мельник Т. А., Волчкова Г. К. Досвід застосування LSM Moodle при дистанційному навчанні у закладах вищої освіти. *Наукові записки. Серія : Педагогічні науки*. Кропивницький : РВВ ЦДПУ ім. В. Винниченка, 2021. № 192. С. 106–111.
6. Трускавецька І. Технології змішаного навчання як інноваційна форма організації готовності майбутніх учителів біології та основ здоров'я в закладах вищої освіти. *Наука і освіта : наук.-практ. журнал*. 2023. № 2. С. 77–82.
7. Hulai O., Shemet V., Moroz I. Design and Organization of Assessment Using the MOODLE. In: Ardimento, P., et al. Higher Education Learning Methodologies and Technologies Online. HELMeTO 2024. *Communications in Computer and Information Science*, vol. 2467. Springer, Cham. 2025. Pp. 309–320.
8. Dantes G. R., Audina I. P., Marsakawati N. P. E., Suwastini N. K. A. Investigating The Zoom Application as A Video Conferencing Platform in The Online Learning Process Based on Teacher's Perception. *Jurnal Nasional Pendidikan Teknik Informatika : JANAPATI*. 2022. № 11(2). P. 133–144.
9. Dudar V. L., Riznyk V. V., Kotsur V. V., Pechenizka S. S., Kovtun O. A. Use of modern technologies and digital tools in the context of distance and mixed learning. *Linguistics and Culture Review*. 2021. № 5(S2). P. 733–750.
10. Maesaroh S. A., Marlana L. Zoom vs. Google Classroom: Which is likely more effective for supporting students' learning in mathematics?. *Beta: Jurnal Tadris Matematika*. 2022. № 14(2). P. 142–153.
11. Mahendra I. W. E. Triging Student Learning Results with Utilizing Google Classroom and Zoom Platform. *Jurnal Ilmiah Sekolah Dasar*. 2021. № 5(2). P. 326–333.

12. Reviandani Wasti. The Effectiveness of Using Blended Learning with Google Classroom and Zoom Media on Students' Understanding. *Innovation research journal*. 2021. № 2 (2). P. 99–118.

#### REFERENCES:

1. Hulai, O., & Kabak, V. (2022). Tsyfrovі instrumenty GOOGLE yak zasib udoskonalennia osvithnoho protsesu v zakladakh vyshchoi osvity [Google digital tools as a means of improving the educational process in higher education institutions]. *Naukovi zapysky Ternopil'skoho natsionalnoho pedahohichnoho universytetu imeni Volodymyra Hnatiuka. Serii: Pedahohika*, 1(2), 14–23. [in Ukrainian].
2. Hulpa, D. V., Yordan, H. M., & Lemesheva, N. V. (2024). Innovatsiini pidkhody do orhanizatsii dystantsiinoho navchannia v zakladakh vyshchoi osvity Ukrainy [Innovative approaches to organizing distance learning in higher education institutions of Ukraine]. *Pedahohichna Akademiia: naukovi zapysky*, 13. [in Ukrainian].
3. Koval, O. (2025). Pidhotovka maibutnikh uchyteliv informatyky do orhanizatsii osvithnoho protsesu v umovakh zmishanoho navchannia [Training future computer science teachers to organize the educational process in blended learning conditions]. *Ukrainskyi Pedahohichnyi zhurnal*, 1, 45–59. [in Ukrainian].
4. Kuchai, O., & Demianiuk, A. (2021). Suchasni tekhnolohii dystantsiinoho navchannia [Modern distance learning technologies]. *Humanitarni studii: istoriia ta pedahohika*, 2, 77–85. [in Ukrainian].
5. Melnyk, T. A., & Volchkova, H. K. (2021). Dosvid zastosuvannia LSM Moodle pry dystantsiinomu navchanni u zakladakh vyshchoi osvity [Experience of using LSM Moodle in distance learning in higher education institutions]. *Naukovi zapysky. Serii: Pedahohichni nauky*, 192, 106–111. Kropyvnytskyi : RVV TsDPU im. V. Vynnychenka. [in Ukrainian].
6. Truskavetska, I. (2023). Tekhnolohii zmishanoho navchannia yak innovatsiina forma orhanizatsii hotovnosti maibutnikh uchyteliv biolohii ta osnov zdorovia v zakladakh vyshchoi osvity [Blended learning technologies as an innovative form of developing the readiness of future biology and health basics teachers in higher education institutions]. *Nauka i osvita: naukovo-praktychnyi zhurnal*, 2, 77–82. [in Ukrainian].
7. Hulai, O., Shemet, V., & Moroz, I. (2025). Design and organization of assessment using the MOODLE. In P. Ardimento et al. (Eds.), *Higher Education Learning Methodologies and Technologies Online (HELMeTO 2024), Communications in Computer and Information Science* (Vol. 2467, pp. 309–320). Springer, Cham.
8. Dantes, G. R., Audina, I. P., Marsakawati, N. P. E., & Suwastini, N. K. A. (2022). Investigating the Zoom application as a video conferencing platform in the online learning process based on teacher's perception. *Jurnal Nasional Pendidikan Teknik Informatika: JANAPATI*, 11(2), 133–144.
9. Dudar, V. L., Riznyk, V. V., Kotsur, V. V., Pechenizka, S. S., & Kovtun, O. A. (2021). Use of modern technologies and digital tools in the context of distance and mixed learning. *Linguistics and Culture Review*, 5(S2), 733–750.
10. Maesaroh, S. A., & Marlana, L. (2022). Zoom vs. Google Classroom: Which is likely more effective for supporting students' learning in mathematics? *Beta: Jurnal Tadris Matematika*, 14(2), 142–153.
11. Mahendra, I. W. E. (2021). Triging student learning results with utilizing Google Classroom and Zoom platform. *Jurnal Ilmiah Sekolah Dasar*, 5(2), 326–333.
12. Reviandani, W. (2021). The effectiveness of using blended learning with Google Classroom and Zoom media on students' understanding. *Innovation Research Journal*, 2(2), 99–118.

Стаття надійшла: 09.11.2025

Прийнято: 26.11.2025

Опубліковано: 30.12.2025

## ЗМІСТ

## ХІМІЯ

**Вікторія ГЕНЧЕВА, Софія КАНАРОВА**

ОЦІНКА ЗАБРУДНЕННЯ МОРСЬКОЇ ВОДИ СТІЙКИМИ ОРГАНІЧНИМИ ПОЛЮТАНТАМИ ПІВНІЧНО-ЗАХІДНОЇ ЧАСТИНИ ЧОРНОГО МОРЯ.....3

**Vira ISHCENKO, Khristina CHEBANENKO, Rostislav BARABASH, Nadia KVITKOVSKA, Elizaveta KOSTENKO, Olexander MAKARENKO**

SPECTROPHOTOMETRIC DETERMINATION OF 5-HYDROXYMETHYLFURFURAL IN HONEY SAMPLES OF VARIOUS BOTANICAL ORIGINS.....10

**Ольга КИЧКИРУК, Ірина ОНИЦУК**

ВПЛИВ ДИФЕРЕНЦІЙОВАНОГО АНТРОПОГЕННОГО НАВАНТАЖЕННЯ НА КИСЛОТНО-ОСНОВНИЙ РЕЖИМ ҐРУНТІВ: ПОРІВНЯЛЬНИЙ АНАЛІЗ ЗОН ТРАНСПОРТНОГО ТА ПРОМИСЛОВОГО ВПЛИВУ.....18

**Вікторія ЛОВЧИЦЬКА, Ярослав КОВАЛИШИН**

ДОСЛІДЖЕННЯ ЗМОЧУВАНOSTІ ГРАФІТОВОЇ ПОВЕРХНІ, МОДИФІКОВАНОЇ ВІДНОВЛЕННЯМ ДІАЗОСОЛІ У ВОДНО-АЦЕТОНІТРИЛЬНОМУ РОЗЧИНІ..... 28

**Жолт КОРМОШ, Наталія ГОРБАТЮК, Юліан ТАРАНЧУК, Вадим ТЕСУНОВ, Анатолій КРОТ, Валентина КОЦАР, Леонід ГНІТЕЦЬКИЙ, Євгеній РОСПОПОВ**

ЕКСТРАКЦІЙНО-ФОТОМЕТРИЧНЕ ВИЗНАЧЕННЯ ТОРАСЕМІДУ..... 35

**Галина РІЗАК**

ВИКОРИСТАННЯ ЯМР-СПЕКТРОСКОПІЇ ДЛЯ ДОСЛІДЖЕННЯ 2,4-ДІОКСО- ТА 4-ІМІНО-2-ОКСО-3-ФЕНІЛ-5-R-6-R'-ТІСНО[2,3-D]ПІРИМІДИНІВ.....42

**Тетяна САВЧУК, Світлана КОРОЛЬЧУК, Оксана ЮРЧЕНКО, Назар ЦАЛКОВСЬКИЙ, Ілля ЯКИМ'ЮК, Олена КЛИМОВИЧ**

ХРОМАТОГРАФІЧНЕ ВИЗНАЧЕННЯ ПАРАЦЕТАМОЛУ ТА ІБУПРОФЕНУ У ФАРМАЦЕВТИЧНИХ ПРЕПАРАТАХ.....51

**Ганна ТКАЧУК, Андрій ТКАЧУК, Олександр СТРЕМЕЦЬКИЙ, Олег МАРЧУК**

РЕНТГЕНОФЛУОРЕСЦЕНТНЕ ДОСЛІДЖЕННЯ СПЛАВІВ, ЩО МІСТЯТЬ ЗОЛОТО ТА СРІБЛО.....59

**Yuliia KHARCHENKO**

AMIDE DERIVATIVES OF 1,2,4-OXADIAZOLE AS PROMISING AGENTS WITH DUAL FUNGICIDAL AND NEMATOCIDAL ACTIVITY.....69

## ЕКОЛОГІЯ

**Oleksiy KOZLOV, Anna ALEKSIEIEVA, Lyudmila HRYHORIEVA, Alona BILOKON**

ENVIRONMENTAL SAFETY AUDIT IN CONDITIONS OF EMERGENCY SITUATIONS BASED ON ARTIFICIAL INTELLIGENCE AND INTERNET OF THINGS TECHNOLOGIES.....79

**Людмила ГЕРАСИМЧУК, Ніна КИРИЛЕНКО, Руслана ВАЛЕРКО, Ірина ПАЦЕВА**

ІНТЕГРАЦІЯ ESG-КРИТЕРІЇВ ТА ЕКОЛОГІЧНИХ СТАНДАРТІВ ЄС У СИСТЕМАХ УПРАВЛІННЯ КАР'ЄРНИМ ТРАНСПОРТОМ.....90

**Людмила ГРИГОР'ЄВА, Костянтин ГРИГОР'ЄВ**

МЕТОДОЛОГІЯ ВИКОРИСТАННЯ ДОЗОВИХ ЦІН  
ПРИ ЕКСПРЕС ОЦІНЮВАННІ ТА МОДЕЛЮВАННІ ЕФЕКТИВНОЇ ДОЗИ  
ВІД ГАЗОАЕРОЗОЛЬНИХ ВИКИДІВ РАДІОНУКЛІДНИХ ПОЛЮТАНТІВ.....98

**Ольга КАРАЇМ, Олександр БАКАРАЄВ, Володимир КАРАЇМ, Зоряна ЛАВРИНЮК,  
Олена ДЖАМ, Людмила САВЧУК**

ОЦІНЮВАННЯ РИЗИКІВ ВІД ВИКИДІВ ВИРОБНИЦТВА АСФАЛЬТОБЕТОННОГО  
ДОРОЖНЬОГО ПОКРИТТЯ ЯК ЧИННИК ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ СТАЛОГО РОЗВИТКУ.....105

**Ганна КІРЕЙЦЕВА, Світлана ХОМЕНКО**

АДАПТАЦІЯ I-TREE ЕСО ДЛЯ ОЦІНКИ ДЕПОНУВАННЯ  
ТА СЕКВЕСТРАЦІЇ ВУГЛЕЦЮ МІСЬКИМИ ДЕРЕВНИМИ НАСАДЖЕННЯМИ  
ПРОМИСЛОВИХ ЗОН УКРАЇНИ.....116

**Людмила САВЧУК, Ольга КАРАЇМ, Зоряна ЛАВРИНЮК, Роман ШУЛИПА**

БІОЛОГІЧНЕ ЗАБРУДНЕННЯ ЗВІРІВСЬКОГО ЛІСНИЦТВА  
НА ПРИКЛАДІ ШКІДНИКІВ ТА ЗАХВОРЮВАНЬ ДЕРЕВНИХ РОСЛИН.....126

### **ОСВІТНІ, ПЕДАГОГІЧНІ НАУКИ. ПРОФЕСІЙНА ОСВІТА**

**Юлія ТРИШЕЧКІНА, Ольга ГУЛАЙ, Ольга РЕДЬКО**

АНАЛІЗ ЕФЕКТИВНОСТІ ВИКОРИСТАННЯ ПЛАТФОРМ MOODLE, GOOGLE CLASSROOM  
ТА ZOOM У ЗМІШАНОМУ НАВЧАННІ.....131

---



---

## CONTENTS

### CHEMISTRY

- Viktoriia GENCHEVA, Sofia KANAROVA**  
ASSESSMENT OF MARINE WATER CONTAMINATION  
BY PERSISTENT ORGANIC POLLUTANTS IN THE NORTHWESTERN PART  
OF THE BLACK SEA.....3
- Vira ISHCENKO, Khristina CHEBANENKO, Rostislav BARABASH, Nadia KVITKOVSKA,  
Elizaveta KOSTENKO, Olexander MAKARENKO**  
SPECTROPHOTOMETRIC DETERMINATION OF 5-HYDROXYMETHYLFURFURAL  
IN HONEY SAMPLES OF VARIOUS BOTANICAL ORIGINS.....10
- Olga KYCHYRUK, Iryna ONYSHCHUK**  
THE IMPACT OF DIFFERENTIATED ANTHROPOGENIC LOADING  
ON THE ACID-BASE REGIME OF SOILS: COMPARATIVE ANALYSIS  
OF TRANSPORT AND INDUSTRIAL IMPACT ZONES.....18
- Viktoria LOVCHYTSKA, Yaroslav KOVALYSHYN**  
MODIFICATION OF GRAPHITE SURFACE BY REDUCTION  
OF DIAZONIUM SALT AND ITS EFFECT ON WETTABILITY.....28
- Zholt KORMOSH, Natalia HORBATYUK, Yulian TARANCHUK, Vadym TESUNOV,  
Anatolii KROT, Valentyna KOTSAR, Leonid HNYTETSKII, Evgeniy ROSPOPOV**  
EXTRACTION-PHOTOMETRIC DETERMINATION OF TORASEMIDE.....35
- Galina RIZAK**  
USE OF NMR SPECTROSCOPY FOR THE STUDY OF 2,4-DIOXO-  
AND 4-IMINO-2-OXO-3-PHENYL-5-R-6-R'-THIENO[2,3-D]PYRIMIDINES.....42
- Tanya SAVCHUK, Svitlana KOROLCHUK, Oksana YURCHENKO, Nazar TSALKOVSKIY,  
Illia YAKYMIUK, Olena KLYMOVYCH**  
CHROMATOGRAPHIC DETERMINATION OF PARACETAMOL  
AND IBUPROFEN IN PHARMACEUTICAL PREPARATION.....51
- Hanna TKACHUK, Andrii TKACHUK, Oleksandr STREMETS KYI, Oleh MARCHUK**  
X-RAY FLUORESCENCE STUDY OF ALLOYS CONTAINING GOLD AND SILVER.....59
- Юлія ХАРЧЕНКО**  
АМІДНІ ПОХІДНІ 1,2,4-ОКСАДІАЗОЛУ ЯК ПЕРСПЕКТИВНІ АГЕНТИ З ПОДВІЙНОЮ  
ФУНГІЦИДНОЮ ТА НЕМАТОЦИДНОЮ ДІЄЮ.....69

### ECOLOGY

- Олексій КОЗЛОВ, Анна АЛЕКСЄЄВА, Людмила ГРИГОР'ЄВА, Альона БІЛОКОНЬ**  
АУДИТ ЕКОЛОГІЧНОЇ БЕЗПЕКИ В УМОВАХ НАДЗВИЧАЙНИХ СИТУАЦІЙ  
НА ОСНОВІ ТЕХНОЛОГІЙ ШТУЧНОГО ІНТЕЛЕКТУ ТА ІНТЕРНЕТУ РЕЧЕЙ.....79
- Liudmyla HERASYMCHUK, Nina KYRYLENKO, Ruslana VALERKO, Iryna PATSEVA**  
INTEGRATION OF ESG CRITERIA AND EU ENVIRONMENTAL STANDARDS  
INTO IN-PIT TRANSPORT MANAGEMENT SYSTEMS.....90

<b><i>Liudmyla GRYGORIEVA, Kostiantyn GRYGORIEV</i></b> METHODOLOGY FOR USING DOSAGE PRICES IN EXPRESS ASSESSMENT AND MODELLING OF EFFECTIVE DOSES FROM GASEOUS AEROSOL EMISSIONS OF RADIONUCLIDES.....	98
<b><i>Olha KARAIM, Oleksandr BAKARAIEV, Volodymyr KARAIM, Zoryana LAVRYNYUK, Olena DZHAM, Liudmyla SAVCHUK</i></b> ASSESSMENT OF RISKS FROM EMISSIONS OF ASPHALT CONCRETE PAVEMENT PRODUCTION AS A FACTOR IN ENSURING SUSTAINABLE DEVELOPMENT.....	105
<b><i>Hanna KIREITSEVA, Svitlana KHOMENKO</i></b> ADAPTATION OF I-TREE ECO FOR ASSESSING CARBON STORAGE AND SEQUESTRATION BY URBAN TREE STANDS IN INDUSTRIAL ZONES OF UKRAINE.....	116
<b><i>Liudmyla SAVCHUK, Olha KARAIM, Zoryana LAVRYNYUK, Roman SHULYPA</i></b> BIOLOGICAL CONTAMINATION OF ZVIRIVSKE FORESTRY: A CASE STUDY OF FOREST PESTS AND TREE DISEASES.....	126
<b>EDUCATIONAL, PEDAGOGICAL SCIENCES</b>	
<b><i>Yulia TRISHECHKINA, Olha HULAI, Olha REDKO</i></b> ANALYSIS OF THE EFFECTIVENESS OF THE USE OF MOODLE, GOOGLE CLASSROOM AND ZOOM PLATFORMS IN BLENDED LEARNING.....	131

## НОТАТКИ

# ПРОБЛЕМИ ХІМІЇ ТА СТАЛОГО РОЗВИТКУ

Випуск 3

Коректура • Ірина Миколаївна Чудеснова

Комп'ютерна верстка • Тетяна Олексіївна Клименко

Підписано до друку: 30.12.2025.

Формат 60x84/8. Гарнітура Times New Roman.

Папір офсет. Цифровий друк. Ум. друк. арк. 16,74. Замов. № 0126/025. Наклад 300 прим.

Видавництво і друкарня – Видавничий дім «Гельветика»

65101, Україна, м. Одеса, вул. Інглєзі, 6/1

Телефон +38 (095) 934 48 28, +38 (097) 723 06 08

E-mail: [mailbox@helvetica.ua](mailto:mailbox@helvetica.ua)

Свідоцтво суб'єкта видавничої справи

ДК № 7623 від 22.06.2022 р.