

ВПЛИВ БУДОВИ МОЛЕКУЛИ КСЕНОБІОТИКУ НА ПРОЦЕС ЕКСТРАКЦІЇ З РОСЛИННОЇ СИРОВИНИ ТА ВИМІРЮВАННЯ ЇХ КІЛЬКОСТІ

Хижан Олена Ісаївна, кандидат хімічних наук, доцент,
доцент кафедри загальної, органічної та фізичної хімії,
Національний університет біоресурсів і природокористування України
olenakhyzhan@nubip.edu.ua

Нестерова Катерина Андріївна, аспірант,
Національний університет біоресурсів і природокористування України
nesterova.nubip@gmail.com

Хижан Олександр Іванович, кандидат хімічних наук,
науковий співробітник відділу хімії гетероциклічних сполук,
*Інститут фізико-органічної хімії і вуглехімії ім.Л.М.Литвиненка НАН
України*
khyzhan@gmail.com

Хижан Анастасія Олександрівна, студент,
Національний університет біоресурсів і природокористування України
akhzyzhan@gmail.com

Ковшун Лідія Олександрівна, доктор технічних наук, професор,
професор кафедри загальної, органічної та фізичної хімії,
Національний університет біоресурсів і природокористування України
kovshunlidiia@nubip.edu.ua

Діючі речовини засобів захисту рослин мають різні механізми дії та фізико-хімічні властивості, і вони відносяться до різних класів органічних та неорганічних речовин. Для досягнення інсектицидного ефекту застосовуються фосфорорганічні сполуки, неонікотиноїди, фенілпіразоли, піретроїди, антраніламіни. Сполуки групи стробілуріну, амінопіримідину,

феноксифіноліну мають фунгіцидну дію. Також використовуються похідні аліфатичних та ароматичних кислот, гетероциклічні сполуки, які мають широкий спектр дії і можуть застосовуватися окремо або в різних комбінаціях.

Перший крок у дослідженні безпеки продуктів рослинного походження - це виділення ксенобіотиків з лабораторних проб рослинного матеріалу. Один з найпоширеніших методів для цього - екстракція. Для цього застосовують різні розчинники, які відрізняються за в'язкістю, температурою кипіння та полярністю. У деяких системах екстрагентів, найбільш важливими параметрами є їх діелектрична проникність та кислотно-основні властивості. Для забезпечення повного розчинення та виділення ксенобіотиків з гомогенізованого зразка рекомендується вибирати розчинник, параметри гідрофільності якого відповідають речовинам, які екстрагуються. Для вилучення полярних сполук, які мають велике значення діелектричної постійної, використовують полярні розчинники, такі як метанол, вода і гліцерин, тоді як для неполярних речовин використовують оцтову кислоту, етанол, ацетон, хлороформ, етиловий ефір, пропанол та інші органічні розчинники та їх комбінації. Полярність молекул визначається величиною дипольного моменту (μ), яка залежить від присутності в молекулі функціональних груп і від розташування їх у просторі. Оскільки полярність сполук відображає їх здатність до міжмолекулярної взаємодії, а значення дипольного моменту є відносним і залежить від умов вимірювання, для розподілу пестицидів за полярністю необхідно використовувати додаткові параметри, що підтверджують правильність такого розподілу. Полярність молекул є фізичною властивістю, яка використовується в деяких дослідженнях для пояснення розподілу та накопичення ксенобіотиків у природних об'єктах. Чим більший дипольний момент, тим краще розчинність у воді. Важливо зауважити, що розподіл пестицидів за групами залежно від величини

дипольного моменту та екстракційні процеси, розроблені для їх модельних систем, не завжди пояснюють, а лише передбачають розподіл ксенобіотиків між органічною та водною фазами.

Рослинні продукти містять значну кількість води, а зерно та насіння мають також ще й ліпідний склад. З урахуванням природного хімічного складу речовин у різних об'єктах продукції рослинництва, можна припустити, що ксенобіотики вже на етапі гомогенізації зразка розподіляються між органічною (ліпідною) та водною фазами. Додавання екстрагентної системи (вода/органічний розчинник) порушує рівновагу концентрацій, що змушує ксенобіотики перерозподілятися у системі. У плодах і овочах кількість ліпідів є незначною. Під час гомогенізації, пестициди можуть або знаходитися в водній фазі, або адсорбуватися на частинках дисперсного середовища. До активних екстрагентів відносяться розчинники, в молекулах яких міститься кисень: спирти, прості ефіри, кетони, етилацетат.

Екстракція за механізмом фізичного розподілу широко використовується для попереднього концентрування ксенобіотиків, які розчинені у воді, при аналізі природних та стічних вод, що забруднені нафтопродуктами та іншими органічними домішками. Під час рідинної екстракції відбувається рівноважний розподіл компонентів між рідинними фазами, що не змішуються. Екстракція неелектролітів відбувається без участі хімічних реакцій і базується на механізмі фізичного розподілу. Кількісною характеристикою цього процесу є коефіцієнт розподілу. Він зазвичай виражається у логарифмічних термінах ($\log P_{ow}$), що робить його зручним параметром для використання.

Згідно величин параметрів (молекулярна маса), електричний дипольний момент (μ), величина коефіцієнту розподілу в системі октанол-вода ($\log P_{ow}$), ксенобіотики розподілено на об'єкти газової та рідинної хроматографії, встановлено шість груп аналітів та шість блок-схем згідно

яких запропоновано проводити підготовку проби. Оскільки встановлені параметри μ та $\log P_{ow}$ не враховують впливу рослинних компонентів системи на процес екстракції аналітів, необхідними залишаються дослідження тривалості процесу екстракції, визначення умов хроматографічного дослідження аналітів в модельних системах та зразках продукції рослинництва.



**МІЖНАРОДНА НАУКОВО-ПРАКТИЧНА КОНФЕРЕНЦІЯ
«ПІСЛЯВОЄННЕ ВІДНОВЛЕННЯ ҐРУНТОВИХ І РОСЛИННИХ
РЕСУРСІВ ТА ПРОДОВОЛЬЧА БЕЗПЕКА КРАЇНИ»**



м. Київ, 20–21 червня 2024 року

МАТЕРІАЛИ МІЖНАРОДНОЇ НАУКОВО-ПРАКТИЧНОЇ КОНФЕРЕНЦІЇ
«ПІСЛЯВОЄННЕ ВІДНОВЛЕННЯ ҐРУНТОВИХ І РОСЛИННИХ РЕСУРСІВ
ТА ПРОДОВОЛЬЧА БЕЗПЕКА КРАЇНИ» (м. Київ, 20–21 червня 2024 року)
НУБІП України, 2024. 222 с.

ОРГАНІЗАЦІЙНИЙ КОМІТЕТ КОНФЕРЕНЦІЇ

–Тонха О.Л., проректор з науково-педагогічної роботи, голова організаційного комітету;

–Літвінов Д.В., директор НДІ рослинництва та ґрунтознавства, професор кафедри агрохімії та якості продукції рослинництва ім. О.І. Душечкіна, співголова організаційного комітету;

–Ткаченко М.А., директор ННЦ «Інститут землеробства НААН» (за згодою);

– Паламарчук Р.П., в.о. директора Державної установи «Інститут охорони ґрунтів України» (за згодою);

–Корнієнко В.І., директор УЛЯБП АПК НУБіП України

–Kashtanova Olena, Prof. Anhalt University of Applied Sciences, Germany (за згодою);

–Kutcher Randy, Prof. Saskatchewan University (за згодою);

–Jean Jong, Prof. Swedish University of Agricultural Sciences (за згодою);

–Ghaley Bhim, PhD. Prof Copenhagen University (за згодою);

–Sahar Azarkamand PhD. Researcher UNESCO Chair in Life Cycle and Climate Change (за згодою);

–Гаврилюк О.С., заступник декана агробіологічного факультету, доцент кафедри садівництва ім. проф. В.Л. Симиренка, секретар оргкомітету.

Члени організаційного комітету:

– Бикін А.В., завідувач кафедри агрохімії та якості продукції рослинництва ім. О.І. Душечкіна;

– Забалуєв В.О., завідувач кафедри ґрунтознавства та охорони ґрунтів ім. проф. М.К. Шикули;

– Завгородній В.М., заступник декана агробіологічного факультету, доцент кафедри технології зберігання, переробки і стандартизації продукції рослинництва ім. проф. Б.В. Лесика;

- Каленська С.М., завідувач кафедри рослинництва
- Коваленко В.П., декан агробіологічного факультету, професор кафедри рослинництва;
- Мазур Б.М., завідувач кафедри садівництва ім. проф. В. Л. Симиренка, кандидат сільськогосподарських наук, доцент;
- Макарчук О.С., завідувач кафедри генетики, селекції і насінництва ім. проф. М. О. Зеленського;
- Подпрятів Г.І., завідувач кафедри технології зберігання, переробки і стандартизації продукції рослинництва ім. проф. Б. В. Лесика;
- Танчик С.П., завідувач кафедри землеробства та гербології;
- Федосій І.О., завідувач кафедри овочівництва і закритого ґрунту;

Редактори випуску:

- **Літвінов Д.В.**, директор НДІ рослинництва та ґрунтознавства, професор кафедри агрохімії та якості продукції рослинництва ім. О.І. Душечкіна, співголова організаційного комітету;
- **Гаврилюк О.С.**, заступник декана агробіологічного факультету, доцент кафедри садівництва ім. проф. В.Л. Симиренка, секретар оргкомітету.