

УДК 661.183:543.422.25

DOI <https://doi.org/10.32782/tnv-tech.2026.2.2.12>

ЕКСТРАКЦІЙНО-ФОТОМЕТРИЧНЕ ВИЗНАЧЕННЯ САЛІЦИЛОВОЇ КИСЛОТИ ДЛЯ АНАЛІТИЧНОГО КОНТРОЛЮ ХАРЧОВИХ СИСТЕМ

Кормош Ж. О. – кандидат хімічних наук, професор кафедри хімії та екології
Уманського державного педагогічного університету імені Павла Тичини
ORCID ID: 0000-0001-6018-8787
Scopus-Author ID: 35580134800

Бохан Ю. В. – кандидат хімічних наук, доцент кафедри харчових технологій
Херсонського державного аграрно-економічного університету
ORCID ID: 0000-0002-9612-7780
Scopus-Author ID: 6603273935

Новікова Н. В. – кандидат сільськогосподарських наук,
завідувач кафедри харчових технологій
Херсонського державного аграрно-економічного університету
ORCID ID: 0000-0001-5393-688X

Вогнівенко Л. П. – кандидат сільськогосподарських наук,
доцент кафедри харчових технологій
Херсонського державного аграрно-економічного університету
ORCID ID: 0009-0002-6381-6659

Метою даної роботи було розроблення високочутливої, селективної та відтворюваної методики екстракційно-фотометричного визначення саліцилової кислоти з використанням катіонного ціанінового барвника астрафлосину FF, придатної для аналітичного контролю її вмісту у харчових системах, лікарських рослинних екстрактах та біологічно активних добавках. Для реалізації мети дослідження поставлено та вирішено ряд завдань: досліджено умови утворення іонного асоціату саліцилату СК з астрафлосином АФ у водних та водно-органічних середовищах; визначено оптимальні значення кислотності середовища, концентрацій реагентів, іонної сили та часу екстракції для забезпечення максимальної аналітичної чутливості; вивчено спектральні характеристики утвореного асоціату та оптимальну довжину хвилі для фотометричних вимірювань; оцінено метрологічні показники методики, зокрема межю виявлення, лінійний діапазон визначення, відтворюваність і правильність, на модельних розчинах саліцилової кислоти.

Теоретичне обґрунтування формування іонного асоціату виконано методами квантово-хімічного та молекулярного моделювання, що підтвердило термодинамічну доцільність процесу та зростання дипольного моменту асоціату, що забезпечує його високу екстракційну здатність у органічну фазу і підвищену аналітичну чутливість фотометричного визначення. Оптимальні умови екстракції передбачають інтервал рН 4–6 та концентрацію астрафлосину АФ $(1,6–2,9) \cdot 10^{-4}$ М, що забезпечує максимальний вихід асоціату отриманню і стабільність аналітичного сигналу.

Методика апробована на модельних розчинах, де підтверджено її високу відтворюваність, правильність і стабільність, що дозволяє розглядати її як потенційно ефективний інструмент для подальшого застосування у контролі харчових продуктів, лікарських

© Кормош Ж. О., Бохан Ю. В., Новікова Н. В., Вогнівенко Л. П., 2026



Стаття поширюється на умовах
ліцензії відкритого доступу CC BY 4.0

рослинних екстрактів та біологічно активних добавок. Перспективи подальших досліджень включають вивчення впливу складних харчових матриць і супутніх компонентів на аналітичний сигнал, адаптацію методики для експресного контролю якості в умовах виробничих та контрольно-аналітичних лабораторій, а також застосування аналогічного підходу з іншими катіонними барвниками для визначення споріднених фенольних та карбоксильних сполук.

Розроблена методика поєднує простоту виконання, доступність реагентів та високу аналітичну чутливість, що робить її перспективною для наукових і прикладних досліджень у сфері харчових технологій і контролю безпеки харчових продуктів.

Ключові слова: саліцилова кислота, астрафлорин FF, іонний асоціат, екстракційно-фотометричний метод, модельні розчини, харчові системи, аналітичний контроль, спектрофотометрія, відтворюваність, аналітична чутливість.

Kormosh Zh. O., Bokhan Yu. V., Novikova N. V., Vohnivenko L. P. Extraction-photometric determination of salicylic acid for analytical control of food systems

The aim of this work was to develop a highly sensitive, selective, and reproducible extraction-photometric method for the determination of salicylic acid using the cationic cyanine dye Astrafloxin AF, suitable for analytical control of its content in food systems, medicinal plant extracts, and dietary supplements. To achieve this goal, a series of tasks were set and addressed: the conditions for the formation of the salicylate ion pair with Astrafloxin AF in aqueous and aqueous-organic media were investigated; optimal values of medium acidity, reagent concentrations, ionic strength, and extraction time were determined to ensure maximum analytical sensitivity; the spectral characteristics of the formed complex and the optimal wavelength for photometric measurements were studied; metrological parameters of the method, including the detection limit, linear range, reproducibility, and accuracy, were evaluated using model solutions of salicylic acid.

The theoretical rationale for ion-pair formation was carried out using quantum-chemical and molecular modeling methods, confirming the thermodynamic feasibility of the process and the increase in the dipole moment of the complex, which ensures its high extractability into the organic phase and enhanced analytical sensitivity for photometric determination. The optimal extraction conditions correspond to a pH range of 4–6 and an Astrafloxin AF concentration of $(1,6–2,9) \cdot 10^{-4}$ M, providing maximal complex yield with toluene and stability of the analytical signal.

The method was tested on model solutions, demonstrating high reproducibility, accuracy, and stability, making it a potentially effective tool for further application in the control of food products, medicinal plant extracts, and dietary supplements. Prospects for further research include studying the influence of complex food matrices and concomitant components on the analytical signal, adapting the method for rapid quality control in production and analytical laboratories, as well as applying a similar approach with other cationic dyes for the determination of related phenolic and carboxylic compounds.

The developed method combines ease of execution, availability of reagents, and high analytical sensitivity, making it promising for both scientific and applied research in the field of food technology and food safety control.

Key words: salicylic acid, Astrafloxin AF, ion-pair, extraction-photometric method, model solutions, food systems, analytical control, spectrophotometry, reproducibility, analytical sensitivity.

Вступ. Консерванти та регулятори росту застосовують у харчовій промисловості для збереження смакових властивостей, зовнішнього вигляду, текстури та подовження строків придатності продуктів харчування. До таких речовин належить і саліцилова кислота (СК), яка є ароматичною одноосновною карбоновою кислотою природного походження та проявляє виражені біологічно активні властивості. СК здатна інгібувати розвиток мікроорганізмів, а також функціонує як рослинний гормон, що обумовлює її можливу присутність у харчових продуктах рослинного походження, лікарських рослинних екстрактах та біологічно активних добавках.

Водночас встановлено, що надлишковий вміст біологічно активних сполук, зокрема саліцилової кислоти, у харчових продуктах може спричиняти небажані фізіологічні реакції, включаючи алергічні прояви, порушення метаболічного

балансу та індивідуальну непереносимість. Клінічні прояви таких реакцій залежать від концентрації речовини, чутливості організму та функціонального стану органів і систем, у яких розвивається відповідь. Окрім цього, перевищення допустимого вмісту СК може негативно впливати на органолептичні показники харчових продуктів, знижуючи їх якість та споживчі властивості.

Саліцилова кислота широко застосовується у медицині, фармацевтичній та косметичній промисловості, а також є вихідною сполукою для синтезу ряду лікарських засобів, зокрема саліцилатів, саліциламідів та ацетилсаліцилової кислоти. У зв'язку з цим СК може надходити в харчові системи як природним шляхом, так і опосередковано – через рослинну сировину, екстракти або продукти суміжних виробництв. Це зумовлює необхідність надійного аналітичного контролю її вмісту у харчових об'єктах.

Сучасні аналітичні методи визначення саліцилової кислоти у складних харчових матрицях часто є трудомісткими, потребують дорогого обладнання та тривалої пробопідготовки, що обмежує їх застосування в умовах рутинного контролю. У цьому контексті перспективними є екстракційно-фотометричні методи з використанням катіонних ціанінових барвників, які забезпечують високу чутливість, селективність і відносну простоту виконання. Застосування астрафлосину АФ, як реагенту для утворення іонних асоціатів із саліциловою кислотою відкриває нові можливості для створення ефективних методик контролю вмісту СК у харчових продуктах та біологічних екстрактах.

Таким чином, розробка та впровадження високочутливої екстракційно-фотометричної методики визначення саліцилової кислоти є важливою науково-практичною задачею, спрямованою на забезпечення безпеки, якості та відповідності харчової продукції сучасним вимогам харчових технологій.

Постановка проблеми. Саліцилова кислота СК (SK) є важливою біологічно активною сполукою, яка виконує функції регулятора росту в рослинах, бере участь у метаболізмі фенольних сполук, а також є проміжним продуктом синтезу фармацевтичних препаратів, косметичних засобів та біологічно активних добавок. У харчовій промисловості СК може бути присутньою як природний компонент у фруктах, овочах, травах та лікарських рослинах, так і як залишкова речовина після обробки рослин регуляторами росту. Контроль за її вмістом у харчових продуктах є важливим як для забезпечення безпеки споживачів, так і для дотримання регламентів щодо допустимих концентрацій активних речовин у продуктах харчування.

Існуючі методи визначення саліцилової кислоти включають спектрофотометрію, хроматографічні методи та електрохімічні підходи. Проте вони мають суттєві обмеження: потребують дорогого обладнання, тривалого часу на підготовку та аналіз, високої кваліфікації персоналу та не завжди забезпечують достатню селективність і чутливість при визначенні СК у складних харчових матрицях, де присутні поліфеноли, органічні кислоти та інші інтерферуючі речовини. Ці обмеження зменшують можливості впровадження таких методик у виробничі лабораторії харчових підприємств, де необхідні оперативні, надійні та високочутливі аналітичні підходи.

Відомо, що катіонні ціанінові барвники, зокрема астрафлосин АФ (АФ), ефективно утворюють комплекси з широким спектром біологічно активних і токсичних сполук, що дозволяє підвищити чутливість та селективність аналітичного визначення. Використання таких барвників у методах екстракційно-фотометричного аналізу дозволяє спростити процедуру підготовки проб, скоротити час аналізу

та забезпечити можливість визначення низьких концентрацій цільових речовин у складних середовищах.

Незважаючи на наявність даних про взаємодію катіонних барвників з різними органічними кислотами, питання застосування астрафлосину АФ для екстракційно-фотометричного визначення саліцилової кислоти саме у харчових системах досі не достатньо досліджене. Це створює нагальну потребу у розробці нової методики, яка поєднувала б високу чутливість, селективність та простоту виконання, забезпечуючи надійний контроль за вмістом СК у продуктах харчування, лікарських рослинних екстрактах та біологічно активних добавках.

Таким чином, актуальність дослідження обумовлена не лише науковою зацікавленістю в механізмах утворення іонних асоціатів саліцилату з астрафлосином АФ, а й практичною потребою створення швидкої, надійної та доступної аналітичної методики для контролю якості та безпеки харчових продуктів, що містять або можуть містити саліцилову кислоту.

Аналіз останніх досліджень і публікацій. Саліцилова кислота (СК) є об'єктом численних наукових досліджень у різних галузях – від органічного синтезу до фармацевтики та харчових технологій [1-21]. Її аналітичне визначення у складних матрицях викликає особливий інтерес через необхідність контролю за безпекою та якістю продуктів харчування, лікарських рослинних екстрактів та біологічно активних добавок.

Сучасні методики спектрофотометричного визначення органічних кислот та фармацевтичних сполук активно розробляються українськими та міжнародними науковцями. Так, дослідження Кормош Ж. та співавт. показали ефективність фотометричного визначення різних фармацевтичних сполук, включно з 5-нітро-2-гідроксibenzenовою кислотою [2], фуросемідом [3], етакриновою кислотою [4], флурбіпрофеном [5], 2-метил-4-хлорфеноксоцтовою кислотою [6] та нестероїдними протизапальними препаратами [7]. Вони продемонстрували, що застосування методів екстракційно-фотометричного аналізу забезпечує високу селективність і чутливість, що є особливо важливим при роботі зі складними біологічними та харчовими матрицями.

Особливу увагу приділяють використанню катіонних ціанінових барвників, таких як астрафлосин АФ, для утворення іонних асоціатів із органічними кислотами. Так, Кормош Ж. та співавт. досліджували фотометричне визначення дикамби [8], пентахлорфенолу [9], 2,4-дихлорфеноксоцтової кислоти [10], мефенамової кислоти [11] та інших кислот у водних розчинах і фармацевтичних препаратах [12–16]. Результати цих досліджень підтверджують, що екстракційно-фотометричні підходи з використанням барвників забезпечують швидке і чутливе визначення аналітів навіть у складних середовищах.

Додатково, роботи Bazel Y. та співавт. [17–19] висвітлюють фізико-хімічні властивості поліметинових барвників у водних розчинах і їх аналітичний потенціал, що підкреслює можливість застосування цих реагентів для точного визначення саліцилової кислоти у харчових продуктах та лікарських рослинних екстрактах.

Ряд зарубіжних досліджень присвячено визначенню саліцилової кислоти безпосередньо у харчових продуктах. Зокрема, у роботі [20] проведено кількісне визначення СК у фруктах, овочах та соках методом високоефективної рідинної хроматографії. Показано, що вміст саліцилової кислоти суттєво залежить від виду сировини, ступеня стиглості та умов технологічної обробки. Автори відзначають складність пробопідготовки та необхідність дорогого обладнання, що обмежує використання методу для рутинного харчового контролю.

У дослідженні [21] саліцилову кислоту визначали у рослинній харчовій сировині та продуктах її переробки з використанням хроматографічних і спектрофотометричних підходів. Отримані результати підтвердили присутність СК у ряді продуктів рослинного походження в концентраціях, що потребують аналітичного контролю. Разом із цим автори наголошують на доцільності розробки простіших, швидших і більш доступних методик, адаптованих до аналізу багатокomпонентних харчових матриць.

Разом із цим, у сучасній літературі відсутні систематичні дослідження, присвячені екстракційно-фотометричному визначенню саліцилової кислоти саме у харчових системах із застосуванням астрафлосину АФ. Це створює наукову та практичну потребу у розробці нової методики, яка поєднувала б високу чутливість, швидкість аналізу та простоту виконання, забезпечуючи надійний контроль за вмістом СК у продуктах харчування та біологічно активних добавках.

Таким чином, проведений аналіз літератури свідчить про актуальність дослідження екстракційно-фотометричного визначення саліцилової кислоти із застосуванням катіонних барвників, що відкриває перспективи його застосування в аналітичній практиці харчових та фармацевтичних лабораторій.

Мета та завдання дослідження. Метою цієї роботи є створення нової високочутливої, селективної та відтворюваної методики екстракційно-фотометричного визначення саліцилової кислоти із застосуванням катіонного ціанінового барвника астрафлосину АФ, придатної для аналітичного контролю її вмісту у харчових системах, зокрема у продуктах рослинного походження, лікарських рослинних екстрактах та біологічно активних добавках.

Для досягнення поставленої мети у роботі передбачалося розв'язання таких завдань:

- дослідити умови утворення іонного асоціату саліцилату з астрафлосином АФ у водних та водно-органічних середовищах;
- встановити оптимальні значення кислотності середовища, концентрацій реагентів, іонної сили та часу екстракції, що забезпечують максимальну аналітичну чутливість методу;
- вивчити спектральні характеристики утвореного іонного асоціату та визначити оптимальну довжину хвилі для фотометричних вимірювань;
- оцінити метрологічні характеристики розробленої методики, зокрема лінійний діапазон визначення, межу виявлення, межу кількісного визначення та відтворюваність результатів;
- дослідити вплив можливих супутніх компонентів харчових матриць (органічних кислот, поліфенолів, цукрів) на точність визначення саліцилової кислоти;
- апробувати запропоновану методику на модельних харчових системах та реальних зразках харчових продуктів і рослинних екстрактів з метою оцінки її практичної придатності для рутинного контролю якості;
- порівняти отримані результати з даними, наведеними в літературі, та оцінити перспективи впровадження методики в лабораторну практику харчових і аграрних підприємств.

Реалізація зазначених завдань спрямована на розширення аналітичних можливостей екстракційно-фотометричних методів та створення доступного інструменту контролю вмісту саліцилової кислоти у харчових продуктах, що відповідає сучасним вимогам харчових технологій і безпеки харчування.

Матеріали і методи дослідження.

Реагенти та матеріали

Для приготування стандартних і робочих розчинів використовували саліцилову кислоту аналітичної чистоти. Вихідний стандартний розчин саліцилової кислоти з концентрацією 0,01 М готували шляхом розчинення точної наважки речовини у 0,1 М розчині гідроксиду натрію. Робочі розчини з концентраціями ($1 \cdot 10^{-4}$ – $1 \cdot 10^{-3}$) М одержували послідовним розведенням вихідного розчину дистильованою водою безпосередньо перед проведенням експерименту.

Розчин катіонного ціанінового барвника астрафлосину АФ з концентрацією $1 \cdot 10^{-3}$ М готували розчиненням точної наважки барвника (Jiacheng-Chem Enterprises Ltd., Китай) у дистильованій воді з додаванням етилового спирту. Кислотність досліджуваних розчинів регулювали внесенням універсального буферного розчину, а також розчинів сірчаної кислоти або гідроксиду натрію кваліфікації ч.д.а. Іонну силу середовища підтримували за допомогою 2 М розчину сульфату натрію (ч.д.а.). Як органічний екстрагент використовували толуен аналітичної чистоти.

Апаратура

Спектрофотометричні вимірювання здійснювали на спектрофотометрі СФ-2000 (ЛОМО, Росія) з використанням кварцових кювет. Значення рН розчинів визначали потенціометричним методом за допомогою іономіра AI-123 (MLsoft Instruments, Україна), оснащеного комбінованим скляним електродом.

Методика дослідження

Екстракцію іонного асоціату саліцилату з астрафлосином АФ проводили за температури (18–20)⁰С у скляних посудинах із притертими корками. До досліджуваного водного розчину, що містив (4,2–254,4) мкг саліцилової кислоти, послідовно додавали 0,5 см³ універсального буферного розчину з рН 6, 0,8 см³ розчину астрафлосину АФ концентрації $1 \cdot 10^{-3}$ М та 2,0 см³ 2 М розчину Na₂SO₄. Об'єм водної фази доводили до 5,0 см³ дистильованою водою.

Після цього додавали 5,0 см³ толуену та проводили екстракцію протягом 1 хв інтенсивним струшуванням. Після розшарування фаз органічний екстракт відокремлювали та центрифугували для повного видалення слідів водної фази. Оптичну щільність отриманих екстрактів вимірювали на спектрофотометрі при довжині хвилі 546 нм у кварцових кюветах з товщиною шару $l = 0,5$ см.

Виклад основного матеріалу. З метою теоретичного обґрунтування можливості утворення та стабільності іонного асоціату (ІА) саліцилової кислоти з катіонним ціаніновим барвником астрафлосином АФ було застосовано методи квантово-хімічного та молекулярного моделювання. За допомогою математичного моделювання оцінено енергоефективність процесу формування ІА, а також розраховано дипольні моменти як окремих іонів, так і утвореного асоціату.

Молекулярне моделювання системи «СК⁻ + АФ⁺» виконували з використанням програмного пакета *HyperChem 8.0* для різних початкових варіантів взаємного просторового розташування протіонів (процедура *single point*). Геометричну оптимізацію іонів здійснювали методом молекулярної механіки ММ+, що дозволило визначити найбільш енергетично вигідну конфігурацію системи.

Стандартну ентальпію утворення (ΔH^0) окремих іонів та іонного асоціату «СК⁻ + АФ⁺» розраховували напівемпіричним методом РМЗ. Параметри розрахунків підбирали з урахуванням необхідності максимально точного відтворення експериментальних значень термодинамічних характеристик органічних сполук. Отримані енергетичні характеристики та значення дипольних моментів компонентів взаємодії наведено в таблиці 1.

Таблиця 1

**Енергетичні характеристики та дипольні моменти
компонентів взаємодії в системі СК⁻ + АФ⁺**

Частина	Е, кДж/моль	Дипольний момент, Дебай
АФ ⁺	24290,2	2,7
СК ⁻	7376,0	10,7
Σ (СК ⁻ + АФ ⁺)	31666,2	-
ІА	31895,1	30,5
Σ (СК ⁻ + АФ ⁺) – СК·АФ ⁺	228,9	-

Як свідчать результати розрахунків, різниця між енергією утворення іонного асоціату та сумарними енергіями утворення його окремих компонентів становить 228,9 кДж/моль, що підтверджує термодинамічну доцільність формування ІА. Характерною особливістю системи є значне зростання дипольного моменту іонного асоціату порівняно з вихідними іонами, що пояснює його підвищену здатність до екстракції в органічну фазу та обумовлює високу чутливість фотометричного визначення.

Оптимізація умов екстракції

Саліцилова кислота є двоосновною органічною кислотою з константами дисоціації $pK_1 = 2,7$ та $pK_2 = 7,5$. У діапазоні значень рН 2,7–7,5 вона переважно перебуває в однозарядній аніонній формі, що є необхідною умовою для утворення іонного асоціату з катіонним барвником. Астрафлосин АФ у водних розчинах може існувати у протонованій формі (RH_2^+), однозарядній катіонній формі (R^+) та гідролізованій формі (ROH). Відповідні константи протолізу АФ становлять $pK_1 = -1,18$ та $pK_2 = 13,6$ [17, 18].

У широкому інтервалі рН у водних розчинах переважає однозарядна іонна форма АФ⁺, яка характеризується інтенсивним забарвленням і високим молярним коефіцієнтом світлопоглинання ($\epsilon_{540} \approx 1,0 \cdot 10^5$). Експериментальне дослідження впливу кислотності середовища на ефективність екстракції ІА показало, що максимальне вилучення іонного асоціату толуеном спостерігається в інтервалі рН 4–6, що було прийнято як оптимальні умови аналізу.

Досліджено вплив концентрації астрафлосину АФ на оптичну густину толуенових екстрактів. Встановлено, що максимальна екстракція досягається за концентрації барвника $(1,6-2,9) \cdot 10^{-4}$ М. Подальше збільшення концентрації реагенту не призводить до зростання аналітичного сигналу, оскільки надлишок АФ залишається у водній фазі. Рівноважний стан системи встановлюється протягом 50–60 с, що свідчить про швидкість процесу і є важливим з точки зору експресного аналізу харчових об'єктів.

Іонні асоціати ефективно екстрагуються ароматичними вуглеводнями. З урахуванням токсичності бензену як екстрагенти було випробувано о-ксилен та толуен. Подальші дослідження проводили з використанням толуену, оскільки за цих умов фонове світлопоглинання контрольних зразків є мінімальним, що забезпечує кращу точність фотометричних вимірювань.

Стехіометрія та аналітичні характеристики

Стехіометрію іонного асоціату саліцилової кислоти з астрафлосином АФ встановлювали спектрофотометричними методами ізомолярних серій та зсуву хімічної рівноваги. Отримані результати свідчать, що співвідношення компонентів в іонному асоціаті становить 1:1.

На основі оптимізованих умов розроблено методику екстракційно-фотометричного визначення саліцилової кислоти. Її правильність і точність перевіряли методом «введено – знайдено» на модельних розчинах. Результати наведено в таблиці 2.

Таблиця 2

**Результати визначення саліцилової кислоти
в модельних розчинах (n = 5, P = 0,95)**

Введено СК, мкг	Знайдено СК, мкг					
	В день апр. методики	Sr, %	R, %	На наст. день	Sr, %	R, %
6,95	6,90	1,4	99,3	6,92	1,9	99,6
13,92	13,90	1,3	99,9	13,86	1,2	99,6
20,88	20,90	2,1	100,0	20,88	2,2	100
27,84	27,79	1,8	99,8	27,78	2,3	99,8

Отримані дані свідчать про високу відтворюваність, правильність та стабільність методики як у день її апробації, так і при повторних вимірюваннях.

З метою теоретичного обґрунтування можливості утворення та стабільності іонного асоціату саліцилової кислоти з катіонним ціаніновим барвником астрафлосином АФ було застосовано методи молекулярного моделювання. Результати геометричної оптимізації системи «СК⁻ + АФ⁺» свідчать про формування стійкого іонного асоціату за рахунок електростатичної взаємодії між протилежно зарядженими іонами. Оптимізована просторова конфігурація іонного асоціату, а також розподіл електронної густини в системі наведені на рис. 1. Як видно з рисунка, зближення аніонної форми саліцилової кислоти та катіонної форми астрафлосину АФ супроводжується значною поляризацією системи, що зумовлює зростання дипольного моменту асоціату і пояснює його підвищену здатність до екстракції в органічну фазу.

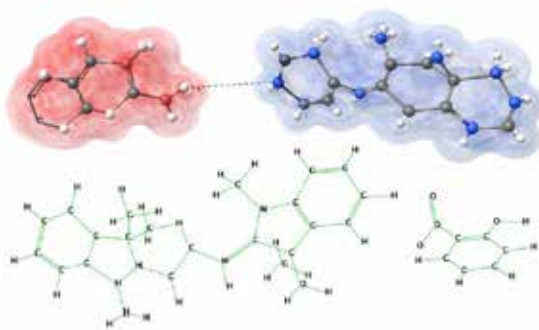


Рис. 1. Просторова модель іонного асоціату саліцилату СК (SK) з катіонним ціаніновим барвником астрафлосином АФ (AF) (SK⁻·AF⁺), отримана методом молекулярного моделювання

На рисунку 1 представлено оптимізовану геометрію іонного асоціату, утвореного внаслідок електростатичної взаємодії аніонної форми саліцилової кислоти

SK^- (CK^-) та катіонної форми астрафлосину АФ (AF^+). Аніон саліцилату локалізований у лівій частині моделі та характеризується зоною підвищеної електронної густини (позначено червоним кольором), що відповідає негативному заряду карбоксилатної групи. Катіон астрафлосину АФ розташований у правій частині асоціату та представлений ділянкою зниженої електронної густини (синє забарвлення), що відображає позитивний заряд барвника.

Контакт іонів здійснюється за рахунок кулонівського притягання між протилежно зарядженими фрагментами молекул, що забезпечує формування стехіометричного іонного асоціату складу 1:1. Просторова орієнтація компонентів сприяє значному зростанню дипольного моменту системи порівняно з вихідними іонами, що узгоджується з результатами квантово-хімічних розрахунків та зумовлює високу екстракційну здатність асоціату в органічну фазу.

Отримана модель наочно підтверджує термодинамічну доцільність утворення іонного асоціату $SK^- \cdot AF^+$ та слугує теоретичним обґрунтуванням розробленої екстракційно-фотометричної методики визначення саліцилової кислоти, що характеризується високою чутливістю, селективністю та відтворюваністю при аналізі харчових і рослинних об'єктів.

З урахуванням результатів молекулярного моделювання, а також даних щодо впливу кислотності середовища, концентрацій реагентів і умов екстракції, було розроблено та оптимізовано методику екстракційно-фотометричного визначення саліцилової кислоти з використанням катіонного ціанінового барвника астрафлосину АФ.

Методика визначення саліцилової кислоти



Рис. 2. Схема екстракційно-фотометричного визначення саліцилової кислоти з використанням катіонного ціанінового барвника астрафлосину АФ

Для визначення саліцилової кислоти у досліджуваних зразках у пробірку вносять $1,0 \text{ см}^3$ проби, додають $0,5 \text{ см}^3$ буферного розчину з рН 6 та $0,5 \text{ см}^3$ розчину астрафлоксину АФ концентрації $1,0 \cdot 10^{-3} \text{ М}$. Об'єм водної фази доводять до $5,0 \text{ см}^3$ дистильованою водою, після чого додають $5,0 \text{ см}^3$ толуену та проводять екстракцію протягом 60 с. Після розшарування фаз органічний екстракт відокремлюють, центрифугують і вимірюють його оптичну густину при $\lambda = 546 \text{ нм}$. Вміст саліцилової кислоти визначають за градуйованим графіком, побудованим за аналогічних умов (рис. 2).

Висновки. У результаті проведених досліджень розроблено нову екстракційно-фотометричну методику визначення саліцилової кислоти, що ґрунтується на утворенні іонного асоціату між аніонною формою саліцилової кислоти та катіонним ціаніновим барвником астрафлоксина АФ. Запропонований підхід не потребує використання складного або дорогого аналітичного обладнання, є технологічно простим у виконанні та характеризується задовільними метрологічними показниками, що робить його придатним для рутинного аналітичного контролю.

Вперше для визначення саліцилової кислоти використано нову аналітичну форму – іонний асоціат саліцилату з астрафлоксина АФ, утворення та стабільність якого теоретично обґрунтовано методами квантово-хімічного та молекулярного моделювання. Показано, що формування іонного асоціату є термодинамічно доцільним і супроводжується суттєвим зростанням дипольного моменту системи, що зумовлює його високу екстракційну здатність у органічну фазу та забезпечує підвищену аналітичну чутливість фотометричного визначення.

Встановлено оптимальні умови екстракції іонного асоціату з водної фази, а саме інтервал кислотності середовища рН 4–6 та концентрацію астрафлоксину АФ $(1,6\text{--}2,9) \cdot 10^{-4} \text{ М}$. За цих умов досягається максимальне вилучення асоціату толуеном і стабільність аналітичного сигналу. Умовний молярний коефіцієнт світлопоглинання іонного асоціату становить $1,0 \cdot 10^5$, що забезпечує низьку межу виявлення саліцилової кислоти – $0,68 \text{ мкг/см}^3$ та широкий лінійний діапазон визначення.

Результати апробації методики на модельних розчинах підтверджують її високу правильність, відтворюваність і стабільність у часі, що дозволяє рекомендувати запропонований підхід для аналітичного контролю вмісту саліцилової кислоти.

Перспективи подальших досліджень полягають у розширенні області застосування розробленої методики для аналізу реальних харчових продуктів, лікарської рослинної сировини, рослинних екстрактів та біологічно активних добавок. Доцільним є також вивчення впливу складних харчових матриць і супутніх компонентів на аналітичний сигнал, а також адаптація методики для експресного контролю якості в умовах виробничих і контрольних-аналітичних лабораторій. Окремий інтерес становить можливість застосування аналогічного підходу з використанням інших катіонних барвників для визначення споріднених фенольних і карбоксильних сполук.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ:

1. Саліцилова кислота // Wikipedia – вільна енциклопедія : електрон. ресурс. Режим доступу: https://uk.wikipedia.org/wiki/Саліцилова_кислота (дата звернення: 18.01.2026).
2. Кормош Ж. О., Горбатюк Н. М., Бохан Ю. В., Боркова С. М. Фотометричне визначення 5-нітро-2-гідроксибензенової кислоти // *Achievements of Science and Applied Research* : зб. матеріалів V Міжнар. наук.-практ. конф. (Дублін, Ірландія,

12–14 січня 2026 р.). Dublin : European Open Science Space, 2026. С. 26–30. URL: https://www.eoss-conf.com/wp-content/uploads/2026/01/Dublin_Ireland_12.01.26.pdf (дата звернення: 10.01.2026).

3. Кормош Ж. О., Гнітецький Л. Т., Ковальчук А. В., Сахарук І. М., Тесунов В. О., Крот А. В., Борисюк С. М., Піскач Л. В. Фотометричне визначення фуросеміду в лікарських формах та біорідинах спортсменів // *Проблеми хімії та сталого розвитку*. 2023. № 2. С. 10–15. <https://doi.org/10.32782/pcsd-2023-3-2>

4. Кормош Ж. О., Гнітецький Л. Т., Ковальчук А. В., Сахарук І. М., Тесунов В. О., Крот А. В., Борисюк С. М., Піскач Л. В., Кормош М. О. Фотометричне визначення етакринової кислоти в лікарських формах та біорідинах спортсменів // *Проблеми хімії та сталого розвитку*. 2023. № 3. С. 13–19. <https://doi.org/10.32782/pcsd-2023-3-2>

5. Kormosh Zh., Kormosh N., Lyushuk K., Semenyuk O., Kotsar V., Osyp Yu., Savchuk L. Spectrophotometric determination of flurbiprofen in application to pharmaceutical analysis // *Pharmaceutical Chemistry Journal*. 2022. Vol. 56, No. 7. P. 999–1003. <https://doi.org/10.1007/s11094-022-0274>

6. Kormosh Zh., Shevchuk M., Kormosh N., Korolchuk S., Savchuk T., Suprunovich S. Photometric extraction detection of 2-methyl-4-chlorophenoxyacetic acid in water // *Journal of Water Chemistry and Technology*. 2022. Vol. 44, No. 5. P. 362–368. DOI: 10.3103/S1063455X2205006X.

7. Antal I., Kormosh Zh., Kotsan I., Kormosh N., Savchuk T., Korolchuk S., Yurchenko O., Golub S., Suprunovich S., Panchenko Yu., Tkach V. Selective extraction-photometric determination of non-steroidal anti-inflammatory drugs // *Pharmaceutical Chemistry Journal*. 2021. Vol. 55. P. 516–523. <https://doi.org/10.3103/S1063455X2205006X>

8. Кормош Ж. О., Голуб С. М., Голуб В. О., Горбатюк Н. М., Бохан Ю. В., Юрченко О. М., Шевчук М. В. Утворення, екстракція та аналітичне застосування іонних асоціатів дикамбі з 5-тіоціанато-діндокарбоціаніном // *Методи та об'єкти хімічного аналізу*. 2025. № 1. С. 15–19. <https://doi.org/10.17721/moca.2025.15-19>.

9. Kormosh Zh., Matskiv O. Photometric analysis of pentachlorophenol in water by extraction with astraflxin // *Journal of Water Chemistry and Technology*. 2022. Vol. 44, No. 3. P. 169–174. <https://doi.org/10.3103/S1063455X22030079>.

10. Kormosh Z. A., Zhurba E. S., Antal I. P., Bazel Y. R., Kormosh A. Z. Spectrophotometric determination of 2,4-dichlorophenoxyacetic acid using extraction with astraflxin // *Journal of Analytical Chemistry*. 2020. Vol. 75. P. 909–912. <https://doi.org/10.1134/S1061934820070114>.

11. Kormosh Zh. A., Matviichuk O. Yu., Bazel Ya. R. Extraction-spectrophotometric determination of mefenamic acid in pharmaceutical preparations // *Journal of Analytical Chemistry*. 2014. Vol. 69, No. 10. P. 960–964. <https://doi.org/10.1134/S1061934814100074>.

12. Bazel Y., Hunka I., Kormosh Zh., Andruch V. Spectrophotometric determination of [2-(2,6-dichlorophenylamino)-phenyl]-acetic acid in pure form and in pharmaceuticals // *Spectrochimica Acta Part A*. 2009. Vol. 74. P. 1209–1214. <https://doi.org/10.1016/j.saa.2009.09.038>.

13. Kormosh Zh., Hunka I., Bazel Ya. Spectrophotometric determination of ketoprofen and its application in pharmaceutical analysis // *Acta Poloniae Pharmaceutica*. 2009. Vol. 66, No. 1. P. 3–9.

14. Kormosh Zh., Hunka I., Bazel Ya. Extraction and spectrophotometric determination of diclofenac in pharmaceuticals // *Journal of the Chinese Chemical Society*. 2008. Vol. 55. P. 356–361. DOI: 10.1002/jccs.200800052.

15. Кормош Ж. О., Гунька І. П., Базель Я. Р. Нова аналітична форма для спектрофотометричного визначення диклофенаку в різних об'єктах // *Методи і об'єкти хімічного аналізу*. 2007. Т. 2, № 1. С. 76–81. URL: <http://www.moca.net.ua/07/1/abs-en/abs9e.html> (дата звернення: 10.01.2026).

16. Kormosh Zh., Matskiv O. O., Horbatiuk N. M., Bokhan Yu. V., Yurchenko O. M., Shevchuk M. V. Photometric analysis for trichlorophenoxyacetic acid in water and bottom sediments with the use of extraction // *Journal of Water Chemistry and Technology*. 2024. Vol. 46, No. 6. P. 610–616. <https://doi.org/10.3103/S1063455X24060067>.

17. Bazel Ya., Kormosh Zh., Tolmachev A. State of polymethine (styryl and carbocyanine) indolium derivatives in aqueous solution and their analytical properties // *Journal of Analytical Chemistry*. 2002. Vol. 57. P. 118–124. <https://doi.org/10.1023/A:1014091218429>.

18. Kormosh Zh., Bazel Ya., Tolmachov A. The state and chemical-analytical properties of certain polymethine dyes in aqueous solutions // *Acta Chimica Slovenica*. 2002. Vol. 49. P. 795–804. URL: <http://acta-arhiv.chem-soc.si/49/49-4-795.pdf> (дата звернення: 10.01.2026).

19. Базель Я. Р., Воронич О. Г., Кормош Ж. О. Практичний курс аналітичної хімії. Ч. 1 : навч. посіб. Луцьк : Вежа, 2004. 260 с.

20. Paterson J. R., Baxter G. J., Dreyer J. S., Halket J. M., Flynn R., Lawrence J. R. Salicylic acid content of foods // *Journal of Agricultural and Food Chemistry*. 1996. Vol. 44, No. 2. P. 363–367. DOI: 10.1021/jf950359n.

21. Swain A. R., Dutton S. P., Truswell A. S. Salicylates in foods // *Journal of the American Dietetic Association*. 1985. Vol. 85, No. 8. P. 950–960.

REFERENCES:

1. Salicylic acid. (2026). *Wikipedia, the free encyclopedia*. https://uk.wikipedia.org/wiki/Саліцилова_кислота

2. Kormosh, Zh. O., Horbatiuk, N. M., Bokhan, Yu. V., & Borkova, S. M. (2026). Photometric determination of 5-nitro-2-hydroxybenzoic acid. In *Achievements of Science and Applied Research: Proceedings of the 5th International Scientific and Practical Conference* (pp. 26–30). European Open Science Space. https://www.eoss-conf.com/wp-content/uploads/2026/01/Dublin_Ireland_12.01.26.pdf

3. Kormosh, Zh. O., Hnitetskyi, L. T., Kovalchuk, A. V., Sakharuk, I. M., Tesunov, V. O., Krot, A. V., Borysiuk, S. M., & Piskach, L. V. (2023). Photometric determination of furosemide in pharmaceutical forms and athletes' biological fluids. *Problems of Chemistry and Sustainable Development*, (2), 10–15. <https://doi.org/10.32782/pcsd-2023-2-2>

4. Kormosh, Zh. O., Hnitetskyi, L. T., Kovalchuk, A. V., Sakharuk, I. M., Tesunov, V. O., Krot, A. V., Borysiuk, S. M., Piskach, L. V., & Kormosh, M. O. (2023). Photometric determination of ethacrynic acid in pharmaceutical forms and athletes' biological fluids. *Problems of Chemistry and Sustainable Development*, (3), 13–19. <https://doi.org/10.32782/pcsd-2023-3-2>

5. Kormosh, Zh., Kormosh, N., Lyushuk, K., Semenyuk, O., Kotsar, V., Osyp, Yu., & Savchuk, L. (2022). Spectrophotometric determination of flurbiprofen in application to pharmaceutical analysis. *Pharmaceutical Chemistry Journal*, 56(7), 999–1003. <https://doi.org/10.1007/s11094-022-0274>

6. Kormosh, Zh., Shevchuk, M., Kormosh, N., Korolchuk, S., Savchuk, T., & Suprunovich, S. (2022). Photometric extraction detection of 2-methyl-4-chlorophenoxyacetic acid in water. *Journal of Water Chemistry and Technology*, 44(5), 362–368. <https://doi.org/10.3103/S1063455X2205006X>

7. Antal, I., Kormosh, Zh., Kotsan, I., Kormosh, N., Savchuk, T., Korolchuk, S., Yurchenko, O., Golub, S., Suprunovich, S., Panchenko, Yu., & Tkach, V. (2021). Selective extraction–photometric determination of non-steroidal anti-inflammatory drugs. *Pharmaceutical Chemistry Journal*, 55, 516–523. <https://doi.org/10.1007/s11094-021-02450-9>

8. Kormosh, Zh. O., Golub, S. M., Golub, V. O., Horbatiuk, N. M., Bokhan, Yu. V., Yurchenko, O. M., & Shevchuk, M. V. (2025). Formation, extraction and analytical

application of dicamba ion associates with 5-thiocyanato-diindocarbocyanine. *Methods and Objects of Chemical Analysis*, (1), 15–19. <https://doi.org/10.17721/moca.2025.15-19>

9. Kormosh, Zh., & Matskiv, O. (2022). Photometric analysis of pentachlorophenol in water by extraction with Astraflloxin. *Journal of Water Chemistry and Technology*, 44(3), 169–174. <https://doi.org/10.3103/S1063455X22030079>

10. Kormosh, Z. A., Zhurba, E. S., Antal, I. P., Bazel, Y. R., & Kormosh, A. Z. (2020). Spectrophotometric determination of 2,4-dichlorophenoxyacetic acid using extraction with Astraflloxin. *Journal of Analytical Chemistry*, 75, 909–912. <https://doi.org/10.1134/S1061934820070114>

11. Kormosh, Zh. A., Matviichuk, O. Yu., & Bazel, Ya. R. (2014). Extraction–spectrophotometric determination of mefenamic acid in pharmaceutical preparations. *Journal of Analytical Chemistry*, 69(10), 960–964. <https://doi.org/10.1134/S1061934814100074>

12. Bazel, Y., Hunka, I., Kormosh, Zh., & Andruch, V. (2009). Spectrophotometric determination of [2-(2,6-dichlorophenylamino)-phenyl]-acetic acid in pure form and in pharmaceuticals. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 74, 1209–1214. <https://doi.org/10.1016/j.saa.2009.09.038>

13. Kormosh, Zh., Hunka, I., & Bazel, Ya. (2009). Spectrophotometric determination of ketoprofen and its application in pharmaceutical analysis. *Acta Poloniae Pharmaceutica*, 66(1), 3–9.

14. Kormosh, Zh., Hunka, I., & Bazel, Ya. (2008). Extraction and spectrophotometric determination of diclofenac in pharmaceuticals. *Journal of the Chinese Chemical Society*, 55, 356–361.

15. Kormosh, Zh. O., Hunka, I. P., & Bazel, Ya. R. (2007). A new analytical form for the spectrophotometric determination of diclofenac in different objects. *Methods and Objects of Chemical Analysis*, 2(1), 76–81. <http://www.moca.net.ua/07/1/abs-en/abs9e.html>

16. Kormosh, Zh., Matskiv, O. O., Horbatiuk, N. M., Bokhan, Yu. V., Yurchenko, O. M., & Shevchuk, M. V. (2024). Photometric analysis for trichlorophenoxyacetic acid in water and bottom sediments using extraction. *Journal of Water Chemistry and Technology*, 46(6), 610–616. <https://doi.org/10.3103/S1063455X24060067>

17. Bazel, Ya., Kormosh, Zh., & Tolmachev, A. (2002). State of polymethine (styryl and carbocyanine) indolium derivatives in aqueous solution and their analytical properties. *Journal of Analytical Chemistry*, 57, 118–124. <https://doi.org/10.1023/A:1014091218429>

18. Kormosh, Zh., Bazel, Ya., & Tolmachov, A. (2002). The state and chemical-analytical properties of certain polymethine dyes in aqueous solutions. *Acta Chimica Slovenica*, 49, 795–804. <http://acta-arhiv.chem-soc.si/49/49-4-795.pdf>

19. Bazel, Ya. R., Voronych, O. H., & Kormosh, Zh. O. (2004). *Practical course of analytical chemistry* (Part 1). Vezha.

20. Paterson, J. R., Baxter, G. J., Dreyer, J. S., Halket, J. M., Flynn, R., & Lawrence, J. R. (1996). Salicylic acid content of foods. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 44(2), 363–367. <https://doi.org/10.1021/jf950359n>

21. Swain, A. R., Dutton, S. P., & Truswell, A. S. (1985). Salicylates in foods. *Journal of the American Dietetic Association*, 85(8), 950–960.

Дата першого надходження статті до видання: 14.02.2026

Дата прийняття статті до друку після рецензування: 18.03.2026

Дата публікації (оприлюднення) статті: 21.05.2026