

PLANTA+

НАУКА, ПРАКТИКА ТА ОСВІТА

SCIENCE, PRACTICE AND EDUCATION

28-29 січня 2025 р.
м. Київ, Україна

January 28-29, 2025
Kyiv, Ukraine

Том 1
Volume 1

20
25



МІНІСТЕРСТВО ОХОРОНИ ЗДОРОВ'Я УКРАЇНИ
МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
НАЦІОНАЛЬНИЙ МЕДИЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ О.О. БОГОМОЛЬЦЯ
ІНСТИТУТ БОТАНІКИ ІМ. М.Г. ХОЛОДНОГО НАН УКРАЇНИ
НАЦІОНАЛЬНИЙ ФАРМАЦЕВТИЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

«PLANTA+. НАУКА, ПРАКТИКА ТА ОСВІТА»

Матеріали
V Науково-практичної конференції з міжнародною участю,
присвяченої пам'яті доктора хімічних наук,
професорки Ніни Павлівни Максютіної
(до 100-річчя від дня народження)

Том 1

28-29 січня 2025 року
м. Київ

MINISTRY OF HEALTH OF UKRAINE
MINISTRY OF EDUCATION AND SCIENCE OF UKRAINE
NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF UKRAINE
BOGOMOLETS NATIONAL MEDICAL UNIVERSITY
M.G. KHOLODNY INSTITUTE OF BOTANY
NATIONAL UNIVERSITY OF PHARMACY

«PLANTA+. SCIENCE, PRACTICE AND EDUCATION»

**The proceedings
of the Fifth Scientific and Practical Conference with International
Participation, dedicated to the memory of Doctor of Chemistry
Professor Nina Pavlivna Maksyutina
(on her 100th birthday)**

Volume 1

**28-29 January 2025
Kyiv**

УДК 615.322.03:001.891](477+100)(082)

P71

РЕДАКЦІЙНА КОЛЕГІЯ

Мінарченко В. М., доктор біологічних наук, професор

Карнюк У. В., доктор фармацевтичних наук, професор

Махиня Л. М., кандидат біологічних наук, доцент

Підченко В. Т., кандидат фармацевтичних наук, доцент

Чолак І. С., кандидат фармацевтичних наук, доцент

Ковальська Н. П., кандидат фармацевтичних наук, доцент

Ольшанський І.Г., кандидат біологічних наук

P71 PLANTA+. НАУКА, ПРАКТИКА ТА ОСВІТА: матеріали V науково-практичної конференції з міжнародною участю, присвяченої пам'яті доктора хімічних наук, професорки Ніни Павлівни Максютіної (до 100-річчя від дня народження) (Київ, 28-29 січня 2025 р.). Київ: Паливода А. В., 2025. Т.1. 298 с.

ISBN 978-966-437-807-6 (Повне зібрання)

ISBN 978-966-437-808-3 (Том 1)

Збірник містить матеріали V науково-практичної конференції з міжнародною участю, присвяченої пам'яті доктора хімічних наук, професорки Ніни Павлівни Максютіної (до 100-річчя від дня народження) «PLANTA+. НАУКА, ПРАКТИКА ТА ОСВІТА». У збірнику опубліковано результати наукових досліджень провідних вчених України та іноземних фахівців з питань фітохімічного аналізу, стандартизації лікарської рослинної сировини, інтродукції, ресурсознавства лікарських рослин. висвітлено питання технології та аналізу лікарських засобів рослинного походження, дієтичних добавок, лікувально-профілактичних та косметичних засобів. представлені фармакологічні дослідження з питань безпеки та застосування у клінічній практиці лікарських засобів рослинного походження. Розглянуто проблеми модернізації навчального процесу та орієнтації на дистанційне навчання у закладах освіти.

Матеріали представляють інтерес і можуть бути корисними для широкого кола наукових та науково-педагогічних працівників наукових установ, закладів вищої освіти фармацевтичного, медичного, біологічного профілю, докторантів, аспірантів, студентів, співробітників фармацевтичних підприємств та громадських організацій.

Друкується в авторській редакції. відповідальність за достовірність наданого для видання матеріалу несуть автори одноосібно. будь-яке відтворення тексту без згоди авторів забороняється. матеріали пройшли антиплагіатну перевірку за допомогою програмного забезпечення strikeplagiarism.

ISBN 978-966-437-807-6 (Повне зібрання)

ISBN 978-966-437-808-3 (Том 1)

© Національний медичний університет

імені О. О. Богомольця, 2025

© Колектив авторів, 2025

**CORNUS MAS NANOCOMPOSITES WITH INORGANIC CARRIERS:
STUDY OF ADSORPTION AND BIOACTIVE SUBSTANCE RELEASE**

**Kustovska A.¹, Skwarek E.², Kowalska K.², Paientko V.^{2,3}, Demianenko E.³,
Matkovsky A.³, Gun'ko V.³, Klymenko S.V.⁴, Vedmedenko V.⁵**

¹ Dragomanov Ukrainian State University, Pyrogostr., Kyiv, Ukraine,

² Faculty of Chemistry, Department of Radiochemistry and Environmental
Chemistry, UMCS, Lublin, Poland,

³ Chuiko Institute of Surface Chemistry, Kyiv, Ukraine,

⁴ M.M. Gryshko National Botanical Garden of the National Academy of
Sciences of Ukraine, Kyiv, Ukraine

⁵ Sole Entrepreneur Vita Vedmedenko, Kyiv, Ukraine

kustoa@gmail.com, ewa.skwarek@mail.umcs.pl, kowalska@mail.umcs.pl,
payentkovv@gmail.com, en_demianenko@ukr.net, matkovsky_ak@ukr.net,
vlad_gunko@ukr.net, vita_v@ukr.net

Key words: plant powders, antocian, clay minerals

Introduction. Obtained by the method of mechanochemical activation of a nanocomposite based on the fruits of *Cornus mas* L. (yellow and red varieties) and inorganic components. The use of mechanochemical activation contributes to increasing the bioavailability of bioactive substances (BAS).

At the present stage, science is focused on creating innovative materials to increase the efficiency and availability of natural compounds. A promising direction is the use of nanocomposites based on plant raw materials enriched with bioactive substances (BAS) that have high bioavailability and stability. Dogwood fruits (*Cornus mas* L.) are a source of cyanide-3,5-diglycoside with antioxidant properties, but their extraction is complicated by strong bonds with cell wall biopolymers. Mechanochemical activation, which combines grinding of raw materials with inorganic carriers (clay, diatomite, silica), is a promising technology. Inorganic components destroy membranes, stabilize BAS molecules and increase their sorption properties. The work studies the interaction of plant raw materials and inorganic carriers to create effective nanocomposites, as well as the effect of mechanochemical activation on the properties of materials.

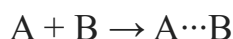
Methods and materials. The study used the fruits of *Cornus mas* L. of two varieties (yellow and red), which were dried and prepared for mechanical processing. Yellow kaolin clay, diatomite, silica A-100 were used as inorganic carriers. Mechanochemical activation was carried out by grinding plant raw materials together with inorganic components. The obtained nanocomposites were used to analyze their properties and compare processing methods.

The interaction of cyanide-3,5-diglycoside molecules with silica and aluminosilicate surfaces was modeled by the PM6-D3H4 method using the MOPAC2016 software, which takes into account covalent, hydrogen and dispersion interactions, analyzing the energy parameters of adsorption for the stability of nanocomposites.

A spectrophotometric method was used to determine the content of cyanidin-3,5-diglycoside. 1 g of sample was kept in 50 ml of 1% aqueous HCl solution for 1 hour,

after which the solution was centrifuged and the optical density was measured at 510 nm. Each measurement was performed three times to increase the accuracy of the results.

Results and Discussion. The theoretical part of this work was performed using the MOPAC2016 program [MOPAC2016, James J. P. Stewart, Stewart Computational Chemistry, Colorado Springs, CO, USA, [HTTP://OpenMOPAC.net](http://OpenMOPAC.net) (2016).] using the PM6-D3H4 method [Řezáč J., Hobza P. Advanced Corrections of Hydrogen Bonding and Dispersion for Semiempirical Quantum Mechanical Methods // Journal of Chemical Theory and Computation, 2012 8 (1). – P. 141-151]. The adsorption enthalpy (ΔH_{298}) during the formation of an intermolecular complex ($A \cdots B$) during the interaction of an anthocyanin molecule (A) with the corresponding adsorbent (B) was calculated according to the reaction:



according to the formula:

$$\Delta H_{298} = H_{298}(A \cdots B) - [H_{298}(A) + H_{298}(B)],$$

where $H_{298}(A \cdots B)$ is the calculated enthalpy of formation of the intermolecular complex, $H_{298}(A)$ is the calculated enthalpy of formation of anthocyanin, $H_{298}(B)$ is the calculated enthalpy of formation of the adsorbent.

It is known from the literature [<https://doi.org/10.3390/plants10040726>, <https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.5b00507>] that Cyanidin 3,5-O-diglucoside has a different structure depending on the pH of the aqueous medium. In particular, in an acidic ($\text{pH} < 3$) environment it exists in the form of a cation, and has a gross composition of $\text{C}_{27}\text{H}_{31}\text{O}_{16}^+$ (Fig. 1), and at pH from 5 to 8 the composition of anthocyanin changes to $\text{C}_{27}\text{H}_{30}\text{O}_{16}$ (Fig. 1, a). Considering the above and taking into account the need to maintain a neutral environment in the conditions of application of cosmetic chemistry, the uncharged form of Cyanin $\text{C}_{27}\text{H}_{30}\text{O}_{16}$ was chosen for research with the silica surface (Fig. 1, b).



Fig. 1. Models of cationic (a) and neutral forms of Cyanidin 3,5-O-diglucoside

The aluminosilicate was modeled based on the structure of kaolinite [<https://doi.org/10.1039/C4CP03566F>, <https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.8b00877>, <https://doi.org/10.1180/claymin.2015.050.3.05>, DOI: 10.2113/gselements.10.3.195], which is the main component of clays, in particular kaolin. Structurally, kaolinite has a layered structure, each layer is an infinite sheet of SiO_4 tetrahedra, which share three oxygen atoms. In addition, each SiO_4 group is connected to an aluminum atom and a hydroxyl through a fourth oxygen

atom at the top of the tetrahedron. The bonds between the layers of kaolinite consist of van der Waals forces and hydrogen bonds. These bonds are strong enough to prevent swelling in water.

The kaolinite model was chosen to be commensurate with the molecule of cyanidin 3,5-O-diglucoside and had a bulk composition of $\text{Al}_3\text{O}_3\text{Si}_2\text{H}_9\text{O}_6$. It contains 28 silicon-oxygen tetrahedra and 30 aluminum-oxygen octahedra. The peripheral aluminum atoms were coordinated by water molecules and $>\text{Al}=\text{O}$ groups. The peripheral silicon atoms are connected to terminal silanol groups.

Since, as mentioned above, kaolinite consists of layers of silicon-oxygen tetrahedra and aluminum-oxygen octahedra, the cyanidin 3,5-O-diglucoside molecule can interact with both the tetrahedra of the kaolinite surface and the aluminum-oxygen octahedra. When the cyanidin 3,5-O-diglucoside molecule interacts with the silica part of the kaolinite surface, an intermolecular complex is formed (**Fig. 2**)

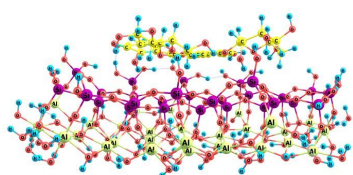


Fig. 2. Intermolecular complex formed by the interaction of the cyanidin 3,5-O-diglucoside molecule with the silicon-oxygen tetrahedra of kaolinite.

In which the adsorbate and adsorbent molecules are interconnected by hydrogen bonds due to siloxane bridges ($\equiv\text{Si}-\text{O}-\text{Si}\equiv$), as well as peripheral silanol groups of the silica surface ($\equiv\text{Si}-\text{OH}$) and functional groups ($=\text{O}$ and $\equiv\text{C}-\text{OH}$) of the adsorbate molecules.

The calculated enthalpy of adsorption (ΔH_{298}) is -430 kJ/mol, the negative value of this value indicates the exothermicity of the adsorption process.

When the cyanidin 3,5-O-diglucoside molecule interacts with the aluminum hydroxide part of the kaolinite surface, an intermolecular complex is formed (**Fig.3**).

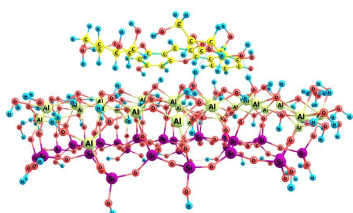


Fig. 3. Intermolecular complex formed by the interaction of the cyanidin 3,5-O-diglucoside molecule with the aluminum-oxygen octahedra of kaolinite.

The adsorbate and adsorbent molecules are interconnected by hydrogen bonds due to surface groups ($=\text{Al}-\text{OH}-\text{Al}=\text{O}$), as well as peripheral hydroxyl groups of the aluminum-oxygen octahedra ($=\text{Al}-\text{OH}$) and functional groups ($=\text{O}$ and $\equiv\text{C}-\text{OH}$) of the cyanidin 3,5-O-diglucoside molecule.

Analysis of the results of quantum-chemical calculations shows that the calculated enthalpy of adsorption (ΔH_{298}) is -514 kJ/mol, which significantly exceeds the value calculated above.

The thermodynamic plausibility of the adsorption process of cyanidin 3,5-O-diglucoside on kaolinite at a neutral pH of the aqueous medium was confirmed, as evidenced by the negative values of the interaction enthalpies in all considered cases.

It was established that the largest ($\Delta H_{298} = -514$ kJ/mol) will be the interaction of cyanidin 3,5-O-diglucoside with alumina octahedra of the kaolinite model, and the similar value is almost 70 kJ/mol smaller ($\Delta H_{298} = -430$ kJ/mol) in the case of the interaction of cyanidin 3,5-O-diglucoside with silicon-oxygen tetrahedra of kaolinite.

Table 1 shows the results of spectrophotometric determination of the content of cyanidin-3,5-diglycoside in various composites. The highest content of this compound is observed in composites with red fruits of Cornus mas, in particular in the composite with yellow clay (0.4073 mg/g). The addition of silica and diatomite to composites with red fruits reduces the content of cyanidin-3,5-diglycoside, but it still remains higher than in samples based on yellow fruits. For composites with yellow fruits, all inorganic carriers (yellow clay, silica, diatomite) significantly reduce the level of cyanidin, which indicates different adsorption efficiency of these compounds depending on the type of carrier.

Table 1. The content of cyanide-3,5-diglycoside in studied samples

№	Sample	C(cyanide-3,5-diglycoside),mg/g
1	Cornus mas red fruit	0,2998
2	Yellow clay/Cornus mas red fruit	0,4073
3	Yellow clay/Silica/ Cornus mas red fruit	0,2780
4	Yellow clay/Diatomit/ Cornus mas red fruit	0,3410
5	Cornus mas yellow fruit	0,1160
6	Yellow clay/Cornus mas yellow fruit	0,0195
7	Yellow clay/Silica/ Cornus mas yellow fruit	0,0115
8	Yellow clay/Diatomit/ Cornus mas yellow fruit	0,0785

Conclusion. The results of quantum-chemical modeling and experimental studies show that mechanochemical activation of composites based on Cornus mas fruits with inorganic carriers significantly improves the bioavailability of bioactive substances, such as cyanidin-3,5-diglycoside.

Quantum-chemical calculations showed that the interaction of cyanidin with aluminum-oxygen octahedra of kaolinite has the highest adsorption energy (-514 kJ/mol), which confirms the strong stability of this complex, compared to the interaction with silicon-oxygen tetrahedra of kaolinite (-430 kJ/mol).

Experimental results of spectrophotometry showed that composites with red Cornus mas fruits have a significantly higher content of cyanidin-3,5-diglycoside compared to composites with yellow fruits, in particular in composites with yellow clay.

Acknowledgments. The authors are grateful to the Visegrad Fund (Vishegrad Scholarship ID 52410142)

<i>Назарова Д.І., Білявський С.М., Бережний Д.А.</i> МЕТАБОЛІЧНІ ЕФЕКТИ БІОЛОГІЧНО АКТИВНИХ РЕЧОВИН ДЕЯКИХ РОСЛИН ПРИ ФІТОТЕРАПІЇ СИНДРОМУ ПОЛІКІСТОЗНИХ ЯЄЧНИКІВ	260
<i>Онуфрович Р.І., Білявський С.М., Яніцька Л.В.</i> ТЕРАПЕВТИЧНИЙ ЕФЕКТ БІОЛОГІЧНО АКТИВНИХ РЕЧОВИН <i>ALLIUM SATIVUM</i> L.	264
<i>Савельєва-Кулик Н.О.</i> МЕТИЛКСАНТИНИ: БЕЗПЕКА І МІЖЛІКАРСЬКІ ВЗАЄМОДІЇ	268
<i>Стативка О.М., Темірова О.А.</i> РОЛЬ ДОБАВОК ВІТАМІНУ D ПРИ ЛІКУВАННІ ПОРУШЕНЬ МЕНСТРУАЛЬНОГО ЦИКЛУ У ЖІНОК	270
<i>Тарковський А.Т., Білявський С.М.</i> МОЛЕКУЛЯРНО-БІОХІМІЧНИЙ ЕФЕКТ БІОЛОГІЧНО АКТИВНИХ РЕЧОВИН НАСІННЯ ЛЬОНУ <i>LINUM USITATISSIMUM</i> L. ПРИ ЛІКУВАННІ ЗАПАЛЬНИХ ЗАХВОРЮВАНЬ ШЛУНКУ	272
<i>Ткачишин В.С.</i> ЗАСТОСУВАННЯ ЗЛАКІВ В ЯКОСТІ ДІЄТИЧНИХ ДОБАВОК ДО РАЦІОНУ ХАРЧУВАННЯ ЛЮДИНИ	276
<i>Ткачишин В.С.</i> ЗАПАШНІ ВОДИ	278

Молекулярні механізми дії біологічно активних речовин 280
рослинного походження
Molecular mechanisms of action for biologically active
substances of plant origin

<i>Kustovska A., Skwarek E., Kowalska K., Paientko V., Demianenko E., Matkovsky A., Gun'ko V., Klymenko S.V., Vedmedenko V.</i> <i>CORNUS MAS</i> NANOCOMPOSITES WITH INORGANIC CARRIERS: STUDY OF ADSORPTION AND BIOACTIVE SUBSTANCE RELEASE	281
<i>Paientko V., Gładysz-Płaska A., Lipka A., Matkovsky A., Yesypchuk O., Kustovska A., Tkachuk O.</i> STRUCTURE OF CLAYS, DIATOMITE, AND LDH AS CARRIERS FOR STABILIZING PLANT POWDERS IN COSMETIC FORMULATIONS	285
<i>Скροцька О.І., Марченко В.В.</i> СУЧАСНІ ТЕНДЕНЦІЇ БІОСИНТЕЗУ НАНОЧАСТИНОК СРІБЛА ПРИ ВИКОРИСТАННІ РОСЛИННОЇ СИРОВИНИ ТА ЇХ БІОЛОГІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ	287



PLANTA+

НАУКА, ПРАКТИКА ТА ОСВІТА
SCIENCE, PRACTICE AND EDUCATION