

Національна академія наук України  
Міністерство освіти та науки України  
Інститут органічної хімії НАН України  
Інститут біоорганічної хімії та нафтохімії  
ім. В.П. Кухаря НАН України  
Ужгородський національний університет



# ***МАТЕРІАЛИ***

**XXVI УКРАЇНСЬКОЇ КОНФЕРЕНЦІЇ  
З ОРГАНІЧНОЇ ТА БІООРГАНІЧНОЇ ХІМІЇ**

Ужгород  
16-20 вересня 2024 р.

УДК 547(043.2)

ББК 24.2

М 341

### ОРГАНІЗАТОРИ

Національна академія наук України

Міністерство освіти та науки України

Інститут органічної хімії НАН України

Інститут біоорганічної хімії та нафтохімії ім. В.П. Кухаря НАН України

Ужгородський національний університет

*У текстах тез доповідей, опублікованих у цьому збірнику, збережено оригінальний авторський стиль у поданні матеріалу та в написанні структурних формул хімічних сполук, схем реакцій і пояснень до них.*

*Original authors' style including interpretation, structural formulae of chemical compounds, schemes of the reactions, and explanations, is presented in the abstracts published in this collection.*

### СПОНСОРИ

НВП «Єнамін», м.Київ  
<http://www.enamine.net>

НВП «Укроргсинтез», м.Київ  
<http://www.uoslab.com>

АТ «Фармак», м.Київ  
<http://www.farmak.ua>

Ужгородський коньячний завод  
Корпорація «Закарпатсадвинпром»  
<http://www.tysa.store>

Матеріали XXVI Української конференції з органічної та біоорганічної хімії. М 341 (Ужгород, 16-20 вересня 2024 р.) – Ужгород: Ужгородський національний університет, 2024. – 259 с.

До збірника ввійшли тексти виступів учасників XXVI Української конференції з органічної та біоорганічної хімії.

УДК 547(043.2)

ББК 24.2

© Ужгородський національний університет, 2024.

**ГОЛОВА**  
**ОРГАНІЗАЦІЙНОГО КОМІТЕТУ**

**ВОВК Михайло Володимирович** - член-кор. НАН України, директор Інституту органічної хімії НАН України

**СПІВГОЛОВИ**

**ВОВК Андрій Іванович** - член-кор. НАН України, директор Інституту біоорганічної хімії та нафтохімії ім. В.П. Кухаря НАН України

**РАССУКАНА Юлія Вікторівна** - заступник директора з наукової роботи Інституту органічної хімії НАН України

**ОНИСЬКО Михайло Юрійович** - завідувач кафедри органічної хімії Ужгородського національного університету

**ПРОГРАМНИЙ КОМІТЕТ**

Воловенко Ю.М. (Київ), Григоренко О.О. (Київ), Іщенко О.О. (Київ), Кальченко В.І. (Київ), Лесик Р.Б. (Львів), Лендел В.Г. (Ужгород), Оковитий С.І. (Дніпро), Кузьмін В.Є. (Одеса), Харченко О.В. (Дніпро), Хиля В.П. (Київ), Чебанов В.А. (Харків), Шермолівч Ю.Г. (Київ), Ягупольський Ю.Л. (Київ).

**ОРГАНІЗАЦІЙНИЙ КОМІТЕТ**

Броварець В.С. (Київ), Волочнюк Д.М. (Київ), Комаров І.В. (Київ), Костюк О.М. (Київ), Обушак М.Д. (Львів), Онисько П.П. (Київ), Сливка М.В. (Ужгород), Смолій О.Б. (Київ), Стасевич М.В. (Львів), Толмачов А.О. (Київ), Черноус В.О. (Чернівці).

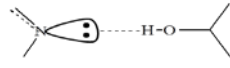
## EFFECTIVE HYDROGEN BONDS IN COMPLEX OF NITROGENIC CONJUGATED HETEROCYCLES WITH BIOMOLECULE FRAGMENTS

N.V. Obernikhina<sup>1</sup>, O.D. Kachkovsky<sup>2</sup>, V.S. Brovarets<sup>2</sup><sup>1</sup>O.O. Bogomolets National Medical University, Kyiv, Ukraine,

nataliya.obernikhina@gmail.com

<sup>2</sup>V.P. Kukhar Institute of Bioorganic Chemistry and Petrochemistry, NASU, Kyiv, Ukraine

The nitrogen-containing heterocyclic  $\pi$ -conjugated molecules are widely used in pharmacy as a favorable platform with specific physical and chemical properties that provide a high probability of binding to biomolecules through non-covalent interactions, then they are a suitable molecular component in the direct design of drugs [1]. This heterocyclic platform contains the di-coordinated nitrogen atom with its lone electron pair (LEP) and then it could form the [HB]-complex with certain functional groups (-OH, -NH<sub>2</sub>, -SH) of amino acid residues. The next step *in silico* study after molecular docking should be founded on the non-empirical methods. The proposed work is devoted to the quantitative assessment of stabilization energies of [HB]-complexes of nitrogen containing heterocycles with biomolecules using the by wB97XD/6-311G(d,p) DFT method (package GAUSSIAN 9) [2], on the example of 1,3-oxazole (Ox) and pyrimidine (Pyr) with the amino acid residue serine (Ser) as an atom donor of hydrogen, the results of which are collected in the Table.

	Binding energies of [HB]-complexes			 Model of of [HB]-complexes		
	E <sub>mol</sub> <sup>a</sup> , a.u.	E <sub>compl</sub> <sup>b</sup> , a.u.	⊗E <sup>c</sup> , kcal/mol	E, eV	f, a.u.	First electron transition
<b>N-Ox</b>	-226.137614	-472.205297	-12.3	6.73	0.001	S <sub>0</sub> → S <sub>1</sub> (HOMO-1 → LUMO)
<b>N-Pyr</b>	-264.219335	-510.289013	-13.4	5.13	0.012	n → π*
<b>Ser</b>	-246.048013					

<sup>a</sup>E<sub>mol</sub> – is total energy of compounds; <sup>b</sup>E<sub>compl</sub> – is total energy of [HB]-complex;  
<sup>c</sup>⊗E – is binding energy increased only the stability of the formed [HB]-complex.

Theoretical calculations show that the first electronic transition for the LEP of the nitrogen atom of the pyrimidine ring is an order of magnitude more intense, requiring 1.6 eV less energy. Therefore, [HB]-complexes with the hydrogen atom of amino acid residues of functional human proteins are formed with the of the pyrimidine nitrogen atom by 1.1 kcal/mol more stable.

Mushta O.I.	3-11
Nepolraj Amaladoss	C-54
Nesterenko H.M.	Д-48
Obernikhina N.V.	3-59
Obushak M.D.	C-4
Omelian T.V.	3-12
Orlova R.K.	3-5
Orysyk S.I.	Д-40
Orysyk V.V.	Д-40
Palchykov V.A.	Д-50
Pashenko A.E.	Д-45, Д-43, C-2
Pendyukh V.V.	Д-72
Peng S.	3-11
Petrov V.	3-11
Petrushka B.M.	3-1
Pilyo S.G.	3-60
Pokhodylo N.	Д-47
Poliudov A.O.	3-12
Popilnichenko S.V.	3-60
Popov I.	Д-45
Popov S. V.	Д-46
Poturai A.S.	Д-57
Puskov V.O.	Д-46

**R-Z**

Radudik A.	C-57
Reshetylova O.K.	C-2
Rodik R. V.	3-3
Rozhenko A.B.	Д-58,3-38
Rudenko T.V.	3-13
Rusanova J.A.	3-11
Ruslan Mariychuk	C-72
Ryabukhin S.V.	C-26, Д-17, Д-45, Д-46, Д-34, Д-57, Д-72
Saraev V.E.	C-8