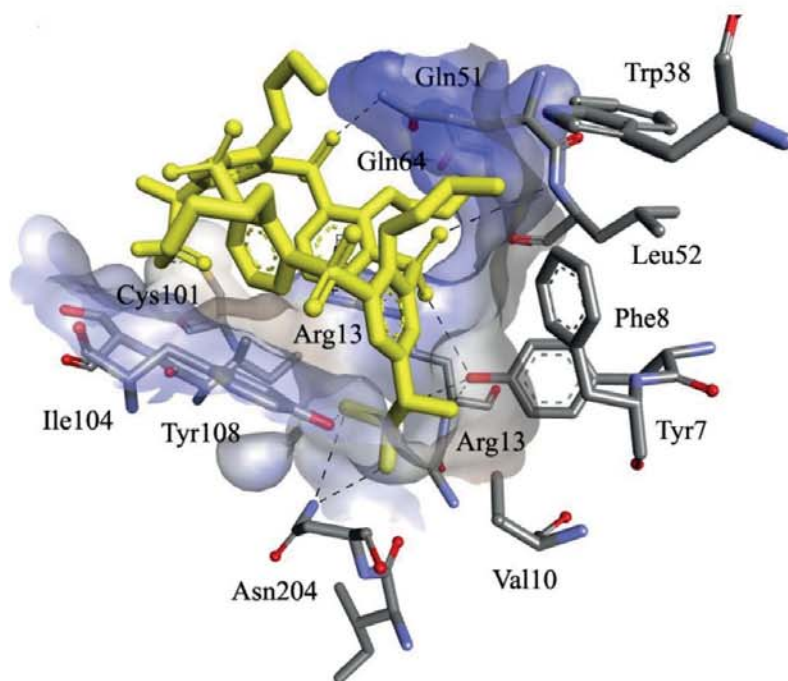


COLLECTION OF ARTICLES «FUNDAMENTAL AND APPLIED RESEARCH IN MODERN CHEMISTRY»

(on the materials of the 5th
International Correspondence Scientific-Practical
Conference of Young Scientists)



ЗБІРНИК СТАТЕЙ «ФУНДАМЕНТАЛЬНІ ТА ПРИКЛАДНІ ДОСЛІДЖЕННЯ В СУЧАСНІЙ ХІМІЇ»

(за матеріалами V Міжнародної заочної науково-практичної
конференції молодих учених)

Ніжин
12 квітня 2018 року

**COLLECTION OF ARTICLES
«FUNDAMENTAL AND APPLIED RESEARCH
IN MODERN CHEMISTRY»**

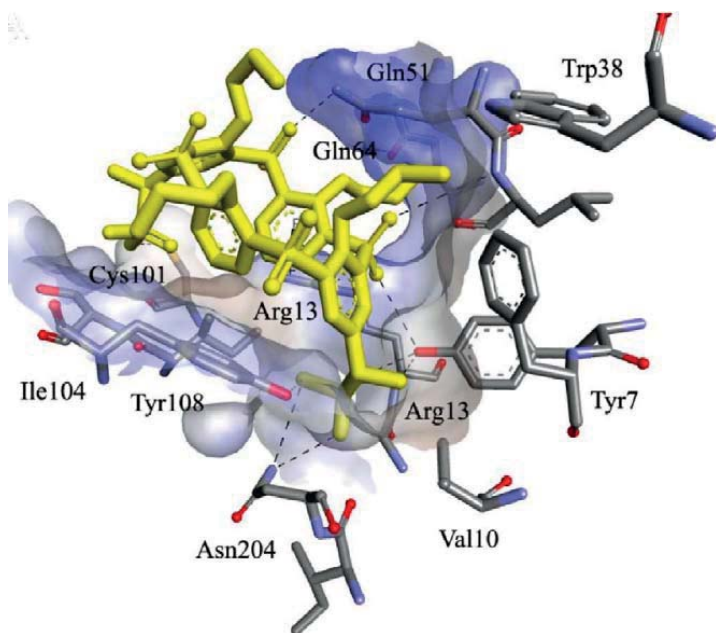
(on the materials of the 5th International Correspondence Scientific-Practical
Conference of Young Scientists: Nizhyn, April 12, 2018)

**ЗБІРНИК СТАТЕЙ
«ФУНДАМЕНТАЛЬНІ
ТА ПРИКЛАДНІ ДОСЛІДЖЕННЯ
В СУЧАСНІЙ ХІМІЇ»**

(за матеріалами V Міжнародної заочної науково-практичної
конференції молодих учених : Ніжин, 12 квітня 2018 р.)

**СБОРНИК СТАТЕЙ
«ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ
И ПРИКЛАДНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ
В СОВРЕМЕННОЙ ХИМИИ »**

(По материалам V Международной заочной научно-практической
конференции молодых учених : Нежин, 12 апреля 2018 г.)



Hosts of conference:

*Nizhyn Gogol State University
Institute of Bioorganic Chemistry and Petrochemistry of NAS of Ukraine
Yuriy Fedkovich Chernivtsy National University
Ternopil Vladimir Gnatiuk National Pedagogical University
National Pedagogical Dragomanov University
Taras Shevchenko National University "Chernihiv Collegium"
Gomel Frantsisko Skorina State University (Byelorussia)
Iakob Gogebashvili Telavi State University (Georgia)
Cracow University of Technology (Poland)
Suleyman Demirel University (Turkey)*

Організатори конференцій:

*Ніжинський державний університет імені Миколи Гоголя
Інститут біоорганічної хімії та нафтохімії НАН України
Чернівецький національний університет імені Ю.Федьковича
Тернопільський національний педагогічний університет імені Володимира Гнатюка
Національний педагогічний університет імені М.П. Драгоманова
Національний університет „Чернігівський колегіум” імені Т.Г.Шевченка
Гомельський державний університет імені Франциска Скорини (Білорусь)
Телавський державний університет імені Якова Гогешашвілі (Грузія)
Краківська політехніка імені Тадеуша Костюшка (Польща)
Університет імені Деміреля Сулеймана (Туреччина)*

Организаторы конференции:

*Нежинский государственный университет имени Николая Гоголя
Институт биоорганической химии и нефтехимии НАН Украины
Черновицкий национальный университет имени Ю.Федьковича
Тернопольский национальный педагогический университет имени Владимира Гнатюка
Национальный педагогический университет имени М.П. Драгоманова
Национальный университет „Черниговский коллегіум” имени Т.Г. Шевченко
Гомельский государственный университет имени Франциска Скорини (Беларусь)
Телавский государственный университет имени Якова Гогешашвили (Грузия)
Краковская политехника имени Тадеуша Костюшко (Польша)
Университет имени Демиреля Сулеймана (Турция)*

УДК 54
ББК 24
С 91

Рекомендовано Вченою радою НДУ ім. М. Гоголя,
(Протокол № 10 від 3.05.2018 р.)

Редакційна колегія :

д.х.н., проф. В. В. Суховєєв (*головний редактор*),
чл.-кор. НАН України А. І. Вовк, д.х.н., проф. В. С. Броварець,
д.х.н., проф. Б. Д. Гришук, д.х.н., проф. О. С. Лявинець,
д.х.н., проф. М. Ш. Гаголішвілі, д.фарм.н., проф. А. М. Демченко,
д.б.н., проф. М. Ф. Гурбуз, д.б.н., проф. І. В. Калінін,
д.п.н., проф. Н. І. Лукашова, к.х.н., доц. Н. І. Дроздова,
к.х.н., доц. О. В. Москаленко, к.х.н., доц. С. А. Циганков,
к.х.н., доц. О. В. Суховєєв, к.б.н., доц. А. В. Семеніхін

Збірник статей «Фундаментальні та прикладні дослідження в сучасній хімії»
за матеріалами V Міжнародної заочної науково-практичної конференції молодих
учених (Ніжин, 12 квітня 2018 р.) / заг. ред. В. В.Суховєєва. – Ніжин : НДУ ім.
Миколи Гоголя, 2018. – 169 с.

ISBN 978-617-527-180-3

Збірник містить статті учасників V Міжнародної науково-практичної кон-
ференції молодих учених «**Фундаментальні та прикладні дослідження в су-
часній хімії**» (м. Ніжин, 12 квітня 2018 р.).

Для молодих науковців та фахівців, що працюють у галузі органічної, біо-
органічної, фармацевтичної, неорганічної та нафтохімії у наукових закладах та
вищій школі.

Тексти статей опубліковані у збірнику із збереженням авторського стилю.

ISBN 978-617-527-180-3

© Автори статей, 2018
© Редакційна колегія, 2018
© НДУ ім. М. Гоголя, 2018

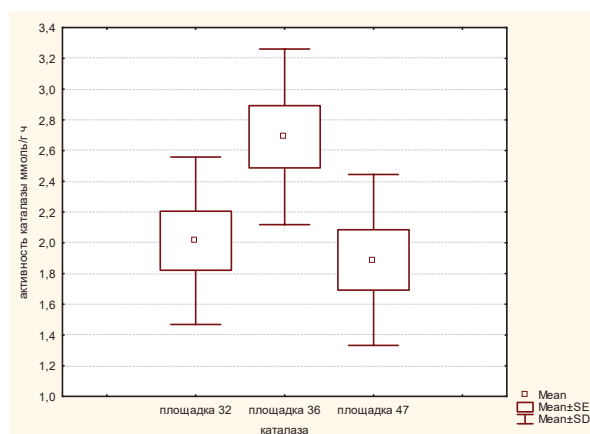


Рис. 2. Активность каталазы в почве стационаров

Литература

1. Гарбуз, С.А. Ферментативная активность воздушно-сухих и водоустойчивых агрегатов почв разного вида использования / С.А. Гарбуз, Н.В. Ярославцева, В.А. Холодов // Бюллетень Почвенного института им. В.В. Докучаева. – 2016. – №82. – С. 42–55.
2. ГОСТ 28168-89. Почвы. Отбор проб. – Введен 01.04.90. – М.: Изд-во стандартов, 1990. – 7 с.
3. Корсунова Ц Д-Ц , Чимитдоржиева Г Д , Балданов Н Д Деструкция органического вещества и ферментативная активность пойменных почв Дельты реки Селенга при антропогенном воздействии // Научное обеспечение устойчивого развития АПК в Сибири Материалы конф. молодых ученых Сиб. федерального округа – Улан-Удэ, 2004. – Ч II. – С 38–40 .
4. Купревич В.Ф., Щербаклова Т.А. Почвенная энзимология. Минск: Наука и техника, 1966.

УДК 544.182.32+547.31.39+547.787.1+547.874.8544.182.32

Велігіна Є.С., Качасва М.В., Оберніхіна Н.В., Пільо С.Г., Качковський О.Д., Броварець В.С.

Інститут біоорганічної хімії та нафтохімії НАН України

КВАНТОВО-ХІМІЧНА ОЦІНКА ДОНОРНО-АКЦЕПТОРНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ АЗОТОВІСНИХ СПРЯЖЕНИХ ГЕТЕРОЦИКЛІВ

Для пояснення зв'язку «структура-активність» азотовмісних біологічно активних сполук нами використаний донорно-акцепторний параметр ϕ_0 , який пов'язаний із відносним розташуванням фронтальних молекулярних орбіталей.

Ключові слова: спряжені гетероцикли, квантово-хімічні розрахунки, донорно-акцепторний параметр.

Для обоснования взаимосвязи «структура-активность» азотсодержащих биологически активных соединений нами использовано донорно-акцепторный параметр ϕ_0 , который связан с относительным положением фронтальных молекулярных орбиталей.

Ключевые слова: сопряженные гетероциклы, квантово-химические расчеты, донорно-акцепторный параметр.

For the elucidation "structure-activity" relationship between nitrogen-containing biologically active compounds the donor-acceptor parameter φ_0 associated with the relative position of the frontal molecular orbitals is used.

Keywords: conjugated heterocycles, quantum chemical calculations, donor-acceptor parameter.

Спряжені гетероцикли привертають увагу як теоретиків, так і експериментальних дослідників завдяки розгалуженій системі π -електронів; особливо актуальним стало використання їх як спеціальних функціональних фрагментів в біологічно активних молекулах [1–3].

Подібні взаємодії повинні залежати, передусім, від донорно-акцепторних властивостей спряжених гетероциклів, які пов'язані з хімічною будовою молекули і топологією спряженої системи [4, 5]. Для оцінки молекулярної топології було запропоновано ряд індексів, які ґрунтуються на застосуванні теорії графів [6, 7].

При дослідженні впливу топології кінцевих гетероциклічних залишків на властивості лінійних спряжених систем, таких як поліметинові барвники та α, ω -заміщені полієни, було запропоновано оцінювати донорні властивості гетероциклів зсувом фронтальних рівнів при введенні кінцевих залишків [7, 8].

Кількісно відносно розташування фронтальних рівнів спряженої молекули раніше [3, 8] було запропоновано оцінювати таким параметром:

$$\varphi_0 = (\epsilon_{\text{НВМО}} - \alpha) / (\epsilon_{\text{НВМО}} - \epsilon_{\text{ВЗМО}}),$$

де $\epsilon_{\text{НВМО}}$ – енергія нижчої вакантної молекулярної орбіталі, $\epsilon_{\text{ВЗМО}}$ – енергія вищої зайнятої молекулярної орбіталі, α – енергія незв'язуючого π -рівня, який відповідає енергії $2p_z$ електрону атома карбону в sp^2 -гібридизації.

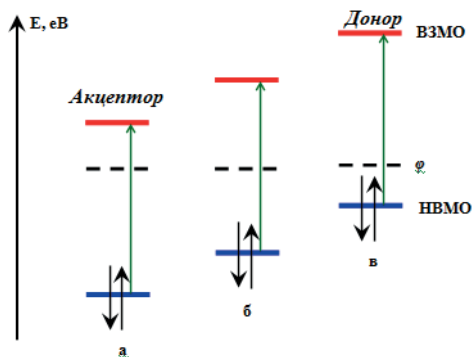


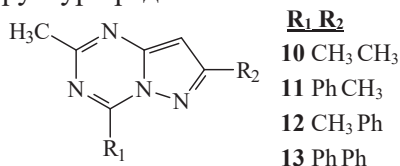
Рис. 1. Відносне розташування фронтальних рівнів в довгому полієні (б), донорній (в) і акцепторній (а) спряжених молекулах.

Для полієнів або ж поліядерних ароматичних молекул α відповідає такому розташуванню фронтальних рівнів, коли донорні та акцепторні властивості збалансовані, тоді $\varphi_0 = 0.5$, тобто енергетична щілина (віддаль між верхнім заповненим і нижнім вакантним рівнями) розташована симетрично відносно віртуального рівня α . Зсув енергетичної щілини вгору (по енергетичній шкалі) і, відповідно, зростання параметра $\varphi_0 > 0.5$, як показано на рис. 1в, вказує на донорний характер спряженої молекули; навпаки, якщо $\varphi_0 < 0.5$ і рівні зсунуті вниз (рис. 1а), це означає переважає акцепторних властивостей молекули.

Саме цей параметр, φ_0 , був використаний в даній роботі для квантово-хімічної оцінки донорно-акцепторних властивостей спряжених азотистих гетероциклів. Всі розрахунки виконувалися в неемпіричному наближенні HF/6-31(d,p), пакет [8].

Цікаво оцінити параметр φ_0 для деяких гетероциклів та проаналізувати як впливає зміна хімічної будови на донорно-акцепторні властивості.

Для прикладу розглянемо похідні піразоло[1,5-*a*][1,3,5]триазину **10-13**; обчислені дані для цих структур представлено в табл. 1.



Як видно з табл. 3, гетероциклічна система **10**, яка містить четвертинний атом азоту з неподіленою парою та три акцепторні двокоординовані атоми азоту, повинна проявляти акцепторні властивості, незважаючи на три донорні метильні замісники. Заміна однієї з метильних груп веде до зниження індекса φ_0 , причому ефект такої заміни в положенні R₁ (сполука **11**) майже вдвічі більший, ніж для положення R₂ (сполука **12**). Отримана зміна параметра φ_0 менша, ніж сума змін в сполуках **11** та **12**.

Таблиця 1

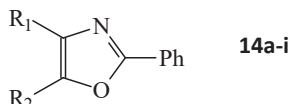
Енергії (в еВ) гетероциклічних систем **10-13**

Молекула	R ₁	R ₂	$\epsilon_{ВЗМО}$	$\epsilon_{НВМО}$	φ_0
10	CH ₃	CH ₃	-8.468	2.866	0.480
11	Ph	CH ₃	-8.320	1.803	0.433
12	CH ₃	Ph	-8.432	2.405	0.460
13	Ph	Ph	-8.337	1.647	0.424

Можна припустити, що значна кількість двокоординованих атомів азоту сприяє зростанню акцепторних властивостей і спорідненості до біологічно активних центрів ферментів.

Припустимо, що введення спряжених акцепторних замісників підвищує таку спорідненість і, відповідно, стабілізує комплекс потенційних фармакофорів з контактною частиною біологічно активного центру.

Так, було оцінено вплив донорних та акцепторних замісників на параметр φ_0 1,3-оксазолів **14**. Результати обрахунків наведено в табл. 2.



Таблиця 2

Енергії МО та індекс φ_0 похідних 1,3-оксазолу **14** (в еВ)

Молекула	R ₁	R ₂	$\epsilon_{ВЗМО}$	$\epsilon_{НВМО}$	φ_0
14a	H	H	-7.45	0.22	0.49
14б	CN	H	-8.03	0.33	0.46
14в	COOCH ₃	H	-7.69	0.17	0.47
14г	H	N(CH ₃) ₂	-6.08	0.64	0.62

14д	CN	N(CH ₃) ₂	-6.72	0.12	0.53
14е	CN	S-CH ₃	-8.33	2.24	0.54
14є	CN	S-Ph	-8.56	2.13	0.53
14ж	SO ₂ C ₆ H ₄ -4-CH ₃	S-CH ₃	-8.30	2.25	0.55
14з	CN	SO ₂ CH ₃	-9.38	1.43	0.46
14і	SO ₂ C ₆ H ₄ -4-CH ₃	SO ₂ CH ₃	-9.18	-0.06	0.38

Для 2-феніл-1,3-оксазолу **14а** донорні та акцепторні властивості зрівноважені. Введення акцепторних груп CN чи COOCH₃ (сполуки **14б**, **14в**) дещо зменшує індекс ϕ_0 , а донорна диметиламіногрупа (сполука **14г**) суттєво його підвищує. Одночасне введення донорних і акцепторних груп (сполуки **14д-ж**) хоча й зменшує значення параметра ϕ_0 , однак у молекулі переважають донорні властивості.

Проведені дослідження протиракової активності 1,3-оксазолів *in vitro* корелюють із значенням параметра ϕ_0 . Дійсно, донорні сполуки **14д-14ж** майже не впливають на біологічну активність, а сполуки з акцепторними замісниками **14з, 14і**, навпаки, проявляють високий рівень інгібування росту ракових клітин [9].

Таким чином, за допомогою запропонованого індекса ϕ_0 , пов'язаного з відносним розташуванням фронтальних молекулярних рівнів, можна оцінювати залежність донорно-акцепторних властивостей азотовмісних спряжених гетероциклів від їхньої хімічної будови та біологічної активності.

Список використаних джерел

1. Sharma V. Biological Importance of the Indole Nucleus in Recent Years: A Comprehensive Review / V. Sharma, P. Kumar, D. Pathak // J. Heterocycl. Chem. – 2010. – 47. – 491–502.
2. Al-Mulla A. A Review: Biological Importance of Heterocyclic Compounds / A. Al-Mulla // Der pharma chem. – 2017. – 9(13). – P. 141–147.
3. Kachkovsky A.D. The nature of electronic transitions in linear conjugated systems / A. Al-Mulla // Russ. Chem. Rev. – 1997. – 66(8). – P. 647–664.
4. Grabowski S.J. Hydrogen bonding strength. – Measures based on geometric and topological parameters / S.J. Grabowski // J. Phys. Org. Chem. A. – 2001. – 105. – P. 10739–10746.
5. N. Trinajstić, Hückel theory and topology. – New York: Plenum Press, 1977. – P. 1–27. – (G.A. Segal (Ed.), Semiempirical Methods of Electronic Structure Calculation. Part A: Techniques).
6. Kachkovsky A.D. Topological indices of bicyclic end-group and electronic properties of linear polymethine system / A.D. Kachkovsky, M.L. Dekhtyar // MATCH Commun. Math. Comput. Chem. – 1995. – 32. – P. 127–146.
7. Bricks J.L. Molecular Design of Near Infrared Polymethine Dyes: A Review / J.L. Bricks, A.D. Kachkovskii, Yu.L. Slominskii, A.O. Gerasov, S.V. Popov // Dyes Pigm. – 2015. – 121. – P. 238–255.
8. Frisch M.J., et al. GAUSSIAN03; revision B.05, Gaussian, Inc., Pittsburgh PA, 2003.
9. Semenyuta I. 1,3-Oxazole derivatives as potential anticancer agents: Computer modeling and experimental study / I. Semenyuta, V. Kovalishyn, V. Tanchyk, S. Piyo, V. Zhabrev, V. Blagodatnyy, O. Trokhimenko, V. Brovarets, L. Meteytsia // Comput. Biol. Chem. – 2016. – 65. – P. 8–15.

Зміст

Абдурахманова Е. Р., Головченко О. В., Броварець В. С. ВЗАЄМОДІЯ ДІЕТИЛОВИХ ЕСТЕРІВ 5-(ГІДРОКСИАЛКІЛАМІНО)-1,3- ОКСАЗОЛ-4-ІЛФОСФОНОВИХ КИСЛОТ З ГІДРОГЕН ХЛОРИДОМ, ГІДРОГЕН ЙОДИДОМ ТА ГІДРОГЕН ТІОЦІАНАТОМ	4
Андрієвська В.В., Москаленко О.В., Суховєєв В.В., Швидко О.В. STEM-ТЕХНОЛОГІЇ ЯК ІННОВАЦІЯ В ХІМІЧНІЙ ОСВІТІ ПОСТІНДУСТРІАЛЬНОГО СУСПІЛЬСТВА	8
Беляева Л.А., Филон А.А. ИССЛЕДОВАНИЯ СВОЙСТВ БИОПОЛИМЕРНОГО БУРОВОГО РАСТВОРА НА ОСНОВЕ КСАНТАНА	12
Булига О.І., Руснак О.В., Скрипська О.В., Обушак М.Д., Ягодинець П.І. СИНТЕЗ ТА ВЛАСТИВОСТІ ПОХІДНИХ ТІАЗОЛУ НА ОСНОВІ 3-(4-АЦЕТИЛФЕНІЛ)-1-МЕТИЛХІНОЛІН-2(1H)-ОНУ	15
Булига О.І., Скрипська О.В. ОРГАНІЗАЦІЯ НАУКОВО-ДОСЛІДНИЦЬКОЇ ДІЯЛЬНОСТІ ШКОЛЯРІВ В ПРОЦЕСІ ВИВЧЕННЯ ТЕМИ «СИНТЕТИЧНІ ИСОКОМОЛЕКУЛЯРНІ РЕЧОВИНИ І ПОЛІМЕРНІ МАТЕРІАЛИ НА ЇХ ОСНОВІ»	18
Yu.V. Burlaka, O.V. Sukhoveev, Yu.V. Kikot, O.M. Khilchevskiy, A.I. Vovk EPR SPECTROSCOPY STUDIES OF CHANGES IN ERYTHROCYTE MEMBRANES IN PATIENTS WITH CHRONIC TONSILLITIS	21
Бурлака М.В., Прибора Н.А. ВИЗНАЧЕННЯ ЛІКАРСЬКИХ СУБСТАНЦІЙ НЕОРГАНІЧНОЇ ПРИРОДИ В УМОВАХ НАВЧАЛЬНОЇ ЛАБОРАТОРІЇ	26
Бучковська О.С., Єфтенєєва Р.І., Лявинець О.С. РОЗКЛАД ГІДРОПЕРОКСИДУ КУМЕНУ ПІД ВПЛИВОМ ПОХІДНИХ 3,4-ДИГІДРОПРИМІДИНОНУ З ФЕНОЛЬНИМ ЗАМІСНИКОМ У ГЕТЕРОЦИКЛІ	28
Валевич Е.В, Дроздова Н.И. ИЗУЧЕНИЕ КАТАЛАЗНОЙ АКТИВНОСТИ ПОЧВ В ЭКОСИСТЕМАХ, СОПРЯЖЕННЫХ С ПЛОЩАДКАМИ ДОБЫЧИ НЕФТИ	32
Велігіна Є.С., Качасва М.В., Оберніхіна Н.В., Пільо С.Г., Качковський О.Д., Броварець В.С. КВАНТОВО-ХІМІЧНА ОЦІНКА ДОНОРНО-АКЦЕПТОРНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ АЗОТОВМІСНИХ СПРЯЖЕНИХ ГЕТЕРОЦИКЛІВ	35
Верега Б.Б, Єфтенєєва Р.І., Лявинець О.С. ВПЛИВ ПОХІДНИХ 3,4-ДИГІДРОПРИМІДИНОНУ З ЧЕТВЕРТИННИМ АМОНІЙНИМ УГРУПОВАННЯМ НА ІНЦІЙОВАНЕ ОКИСНЕННЯ КУМЕНУ	39
Гатальская М.Н., Дроздова Н.И. ВЛИЯНИЕ ИОНОВ СВИНЦА И КАДМИЯ НА СУММАРНУЮ АМИЛОЛИТИЧЕСКУЮ АКТИВНОСТЬ ПРОРОСТКОВ ОЗИМОЙ ТРИТИКАЛЕ	42