

Taras Shevchenko National University of Kyiv
Institute of Physics NAS of Ukraine
Minor Academy of Sciences of Ukraine
Ukrainian Physical Society
under the auspices of
Representative Office of Polish Academy of Sciences in Kyiv

Dedicated to the 100th anniversary
of the National Academy of Sciences of Ukraine

SPECTROSCOPY OF MOLECULES AND CRYSTALS

Book of Abstracts
of XXIII Galyna Puchkovska International School-Seminar
(Kyiv, Ukraine, September 20–25, 2017)

The Book of Abstracts was approved for publication by the Scientific Council of the Institute of Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine (Protocol No. 6 of 13.07.2017)

Spectroscopy of Molecules and Crystals: the Book of Abstracts
S78 of XXIII Galyna Puchkovska International School-Seminar, Kyiv, Ukraine, September 20–25, 2017. – K. : Talkom, 2017. – 258 p.
ISBN 978-617-7397-44-0

The Book contains abstracts of reports presented at XXIII Galyna Puchkovska International School-Seminar “Spectroscopy of Molecules and Crystals” dedicated to the 100th anniversary of the National Academy of Sciences of Ukraine (20-25 September, 2017, Kyiv, Ukraine). The abstracts cover recent advances in theoretical and experimental spectroscopy of crystalline and amorphous solids, liquid crystals, biological objects and polymers, nanosystems, thin films, surface and intermolecular interactions. Non-linear optical phenomena, computer simulation, as well as up-to-date spectroscopic methods and instrumentation are included.

УДК 531:535 (063)

В збірнику представлені тези доповідей XXIII Міжнародної Школи-семінару імені Галини Пучковської “Спектроскопія молекул і кристалів”, присвяченій 100-річчю Національної академії наук України (20-25 вересня 2017 р., Київ, Україна). В тезах викладено нові результати досліджень з основних напрямків сучасної теоретичної і експериментальної спектроскопії неметалічних кристалів, аморфних речовин, рідких кристалів, полімерів і біологічних об’єктів, нанорозмірних систем, тонких плівок, поверхні і міжмолекулярної взаємодії. Також розглянуто такі напрямки як нелінійно-оптичні явища, комп’ютерне моделювання, нові прилади та методи спектральних досліджень.

Donor/Acceptor Properties of Purine and Pyrimidine Bases

N.V. Obernikhina^{2*}, O.D. Kachkovsky¹, L.V. Gayova², V. Shchodryi³

¹Institute of Bioorganic Chemistry and Petrochemistry, NASU, Kyiv, Ukraine

²Bogomolets National Medical University, Department of Bioorganic and Biological Chemistry, Kyiv, Ukraine

³Institute of Molecular Biology and Genetics, NASU, Kyiv, Ukraine

*Corresponding author: nataliya.obernikhina@nmu.ua

The results of numerous studies show that many properties of NA bases, adenine (A), guanine (G), cytosine (C), thymine (T) and uracil (U), depend on relative positions of their frontier molecular levels. The MO energies can be estimated experimentally [1] or quantum-chemically [2]. It was earlier proposed to define the donor/acceptor properties of the conjugated molecules by the parameter φ_0 connecting with relative positions of the frontier levels: $\varphi_0 = (\varepsilon[\text{LUMO}] - \alpha) / (\varepsilon[\text{LUMO}] - \varepsilon[\text{HOMO}])$, where α is an energy gap middle of reference molecule, for example, polyene with balanced donor and acceptor abilities. Similar approach was used for theoretical estimation of the donor/acceptor properties of NA-bases, when $\varphi_0 = 0.5$. The calculations give $\varphi_0 < 0.5$ for high acceptor pyrimidine bases and $\varphi_0 > 0.5$ for purines with their prevalent donor property (Fig. a). The donor/acceptor parameter is shown to be experimentally estimated by electron affinities [2], $\varepsilon[\text{LUMO}]$, and electron transition energy, $(\varepsilon[\text{LUMO}] - \varepsilon[\text{HOMO}])$, (Fig. b).

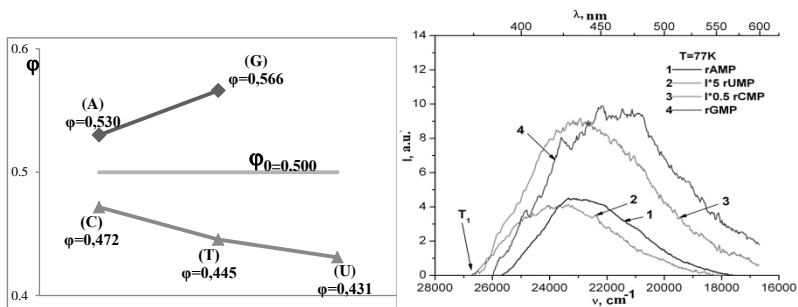


Fig. 1. The donor/acceptor parameter φ for purine and pyrimidine bases (a) and phosphorescence spectrum ribonucleotides (b): the aqueous solution; excitation wavelength $\lambda_{\text{ex}} = 260$ nm, $C_{\text{rAMP, rCMP, rGMP, rUMP}} = 0.34$ mM.

[1]. V.A. Ovchinnikov, D. Sundholm. Coupled-cluster anndden sity function altheorystudiesoftheelectronic 0-0 transitionsofthe DNA bases. //Phys.Chem.Chem.Phys.– 2014. –Vol. 16. – p. 6931 – 6941.

[2]. D. Svozil1, P. Jungwirth, Zdeněk Havlas. Electron binding to nucleic acid bases. Experimental and theoretical studies. //Review. Collect. Czech. Chem. Commun. – 2004. – Vol. 69.–p. 1395-1428.

- Nedilko, S.G., 65, 136
Negriyko, A., 156
Negriyko, A.M., 112
Negrutska, V.V., 121
Nesprava, V.V., 87
Nesterenko, N., 70
Neymash, V., 126
Nikolaenko, T., 57
Nikolaenko, T.Yu., 201
Nikolaienko, A.V., 61
Nikonova, V.V., 36
Nishchuk, A., 126
Nosenko, V., 139
Nosenko, V.V., 211
Novikova, K., 43
Nurimov, A.E., 101
Obernikhina, N.V., 127
Obukhovskiy, V.V., 36
Ogenko, V.M., 151
Ogurtsov A.N., 64
Ogurtsov, A.N., 74, 187
Okhrimenko, O.B., 68
Okrushko, E., 140
Olar, O.I., 165
Onanko, A.P., 128
Onanko, Y.A., 128
Onischenko, A.N., 128
Onykienko, Ye.V., 204
Opanasyuk, A.S., 178, 179
Orel, V.E., 53
Orlova, T., 91
Ostapenko, N., 108
Ostapenko, N.I., 73
Ostapenko, Yu., 108
Ostapenko, Yu.V., 73
Otajonov, Sh., 40
Ovcharenko, O.I., 77, 82
Ovechko, V., 203
Ovsienko, I., 153
Panas, I.D., 17
Panfilov, A.S., 22, 71
Parasyuk, O.V., 60
Paschenko, V.O., 71
Pavlenko, O.L., 163
Pavlov, V., 124, 125
Perederii, O., 156
Pereverzev, N.V., 142
Peschanskii, A.V., 75, 76
Pettersson, L.G.M., 46
Peytcheva, A., 41
Pezeril, T., 198
Piryatinski, Yu.P., 134, 135
Pitsevich, G., 51
Pitsevich, G.A., 46
Pogodin, A., 78
Pogorelov, V., 37, 39, 51, 85
Pogorelov, V.E., 46
Polanska, O.P., 161
Polishchuk, A., 38
Polishchuk, Yu., 139
Ponezha, E.A., 31, 212
Poperenko, L.V., 176, 195,
198, 227, 230
Poperezhai, S., 58, 70
Popovici, C., 238
Popovskii, A.Yu., 191, 192
Portier, X., 139
Posudievskiy, O., 156
Povarchuk, V., 126
Prigodiuk, O.A., 194
Prokopets, V.M., 230
Prorok, V.V., 227

Наукове видання

Спектроскопія молекул і кристалів

Тези доповідей XXIII Міжнародної Школи-семінару
імені Галини Пучковської
(м. Київ, Україна, 20-25 вересня 2017 р.)

Тези надруковано в авторському поданні

Формат 60x90/16. Умовн. друк. арк. 16,12
Наклад 120 пр. Зам. № 54.07-17

*Видавець і виготовлювач ТОВ «Талком»
03115, м. Київ, вул. Львівська, 23, тел./факс (044) 424-40-69, 424-56-26
E-mail: ukraina.vdk@email.ua
Свідоцтво суб'єкта видавничої справи ДК № 4538 від 07.05.2013*