

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  
Східноєвропейський національний  
університет ім. Лесі Українки



# Матеріали

ЮВІЛЕЙНОЇ  
XXV УКРАЇНСЬКОЇ КОНФЕРЕНЦІЇ  
З ОРГАНІЧНОЇ ТА БІООРГАНІЧНОЇ ХІМІЇ,

ПРИСВЯЧЕНОЇ 80-РІЧЧЮ  
ІОХ НАН УКРАЇНИ  
ТА 30-РІЧЧЮ ІБОНХ ім. В.П. КУХАРЯ  
НАН УКРАЇНИ

ЛУЦЬК  
16-20 вересня 2019 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  
Східноєвропейський національний  
університет ім. Лесі Українки

*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	<a href="http://www.enamine.net">http://www.enamine.net</a>
НВП «Укроргсинтез», м.Київ	<a href="http://www.uoslab.com">http://www.uoslab.com</a>
ПАТ «Фармак», м.Київ ПАТ НВП «І.Ф.ЛАБ», м.Київ	<a href="http://www.farmak.ua">http://www.farmak.ua</a>
«І.Ф.ЛАБ», м.Київ	<a href="http://www.iflab.kiev.ua">http://www.iflab.kiev.ua</a>
«Макрохім», м.Київ	<a href="http://www.macrochem.ua">http://www.macrochem.ua</a>

Матеріали XXV Української конференції з органічної хімії. М 341 (Луцьк, 16-20 вересня 2019 р.) – Луцьк: Східноєвропейський національний університет ім. Лесі Українки, 2019. – 259 с.

До книжки ввійшли тексти виступів учасників XXV Української конференції з органічної хімії

**УДК 547(043.2)**

**ББК 24.2**

© Східноєвропейський національний  
університет ім. Лесі Українки, 2019.

## BIOLOGICAL AFFINITY OF SUBSTITUTED 1,3-OXAZOLES: FRAGMENT-TO-FRAGMENT APPROACH

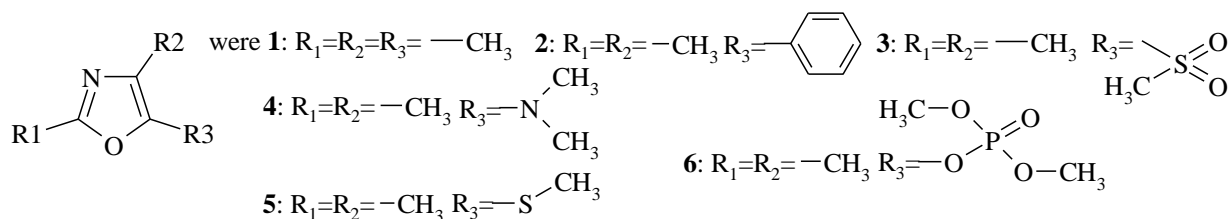
***Obernikhina N.<sup>1</sup>, Zhuravlova M.<sup>2</sup>, Kachkovsky O.<sup>2</sup>, Brovarets V.<sup>2</sup>***

<sup>1</sup>*O.O. Bogomolets National Medical University, 13 T. Shevchenko boul., Kyiv*

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

*1 Murmanskaya Str., Kyiv*

The 1,3-oxazole core can exhibit  $\pi$ -stacking interaction ( $\pi$ -electron affinity). Similar interactions can be simulated between fragments of 1,3-oxazole derivatives and some fragments of a reference  $\pi$ -electron molecule to form a stable complex [**Phar—BioM**] in order to establish a possible mechanism for the action of 1,3-oxazole derivatives, using special parameter  $\varphi_0$  [1]. This approach will be called *the fragment to fragment approach* and evaluated using quantum-chemical simulation. The 1,3-oxazole derivatives considered here can be presented by a general formulae:



Here, The complex with the fullerene C<sub>60</sub> (as a reference acceptor  $\pi$ -system) and compounds **1-6** were considered. The calculated bonding energies of the optimized complex compounds **1-6** [**Fullerene—Het**] are collected in Table.

Fullerene+ Compounds <b>1-6</b>	Energy (E, kcal/mol)		$\Delta\varphi_0$	$\Delta E$ , kcal/mol
	Heterocycle	Full-Het		
[Full – Het <b>1</b> ]	-228371.17	-1662526.63	<b>0.30</b>	<b>9.12</b>
[Full – Het <b>2</b> ]	-348651.31	-1782807.42	<b>0.25</b>	<b>9.76</b>
[Full – Het <b>4</b> ]	-287745.04	-1721901.99	<b>0.40</b>	<b>10.61</b>
[Full – Het <b>5</b> ]	-478220.43	-1912376.82	<b>0.32</b>	<b>10.05</b>
[Full – Het <b>3</b> ]	-572562.36	-2006718.47	<b>0.17</b>	<b>9.77</b>
[Full – Het <b>6</b> ]	-609199.94	-2043357.11	<b>0.21</b>	<b>10.83</b>
<b>Fullerene</b> $\varphi_0=0.29$	-1434146.34			

**Remarks:**  $\Delta\varphi_0 = \varphi_0[\text{compounds } \mathbf{1-6}] - \varphi_0[\text{fullerene}]$ ;  $\Delta E$  is binding energy.

The careful analysis of the generated complex shows that the some additional spatial hindrances can occur in the molecular complex because of the bulk branched constitution of the introduced substituent in the position 5 in compounds **3** and **6**.

[1] N.Obernikhina, M. Kachaeva, V.Shchodryi, Y.Prostota, O.Kachkovsky, V.Brovarets, Z.Tkachuk, *Polycyclic Aromatic Compounds*. – 2019. – Vol. 39 (1). – P. 1–14.

DOI:10.1080/10406638.2018.1538056

**-О-**

<b>Обушак М.Д.</b>	Д-12, Д-38, Д-49, С-40, С-41, С-42, С-43, С-58, С-61
<b>Околовська Л.Г.</b>	З-32
<b>Омельченко І.В.</b>	З-30
<b>Омельянчик Л.О.</b>	З-50
<b>Онисько М.Ю.</b>	Д-14, С-37
<b>Онисько П.П.</b>	Д-15, Д-35, С-44, С-66, С-82
<b>Орисик В.В.</b>	З-31
<b>Орисик С.І.</b>	З-31
<b>Орленко І.В.</b>	З-43
<b>Осип М.А.</b>	З-56
<b>Осип Ю. Л.</b>	З-62, З-56
<b>Охтіна О.В.</b>	С-30
<b>Оцалюк Д.В.</b>	С-19
<b>Очеретнюк А.Д.</b>	С-97

**-П-**

<b>Павловська Т.Л.</b>	С-88
<b>Пальчиков В.О.</b>	Д-12
<b>Панасенко О.І.</b>	З-50
<b>Пантелеймонова Т.М.</b>	З-57
<b>Панчишин С.Я.</b>	З-18
<b>Петко К.І.</b>	С-45
<b>Петріна Р.О.</b>	С-85
<b>Петрук О.М.</b>	Д-24, С-19, С-20
<b>Пехньо В.І.</b>	З-31
<b>Писаненко Д.А.</b>	З-23

**Матеріали ювілейної XXV Української конференції з органічної та біоорганічної хімії, 16-20 вересня 2019 р, Луцьк**

**Упорядники:**

**Вовк Михайло Володимирович**

**Чорноус Віталій Олександрович**

**Сливка Наталія Юріївна**

**Грозав Аліна Миколаївна**

**Відповідальні за випуск:**

**Кальченко Віталій Іванович**

**Вовк Михайло Володимирович**