



Наукові перспективи  
Видавнича група



## СУЧАСНІ АСПЕКТИ МОДЕРНІЗАЦІ НАУКИ: СТАН, ПРОБЛЕМИ, ТЕНДЕНЦІ РОЗВИТКУ

у рамках роботи Видавничої групи  
*"Наукові перспективи"*

Матеріали ХХХІІІ Міжнародної науково-  
практичної конференції (07 червня 2023 року,  
м. Павла (Мальта) дистанційно)



Мирного неба!  
Вільної України!



Міжнародний економічний інститут (Есеніце, Чехія)  
Central European Education Institute (Братислава, Словаччина)  
Національний інститут економічних досліджень (Батумі, Грузія)  
Казахський національний університету імені аль-Фарабі (Казахстан)  
Інститут філософії та соціології Національної Академії Наук Азербайджану  
(Баку, Азербайджан)  
Батумський навчальний університет навігації (Батумі, Грузія)  
Регіональна Академія Менеджменту (Казахстан)  
Громадська наукова організація «Всеукраїнська Асамблея докторів наук з  
державного управління» (Київ, Україна)  
Громадська організація «Асоціація науковців України» (Київ, Україна)  
Університет Новітніх Технологій (Київ, Україна)  
Міждержавна гільдія інженерів консультантів (Київ, Україна)  
Інститут освіти Азербайджанської республіки (Баку, Азербайджан)

*у рамках Видавничої групи «Наукові перспективи»*

# **СУЧАСНІ АСПЕКТИ МОДЕРНІЗАЦІЇ НАУКИ: СТАН, ПРОБЛЕМИ, ТЕНДЕНЦІЇ РОЗВИТКУ**

*Матеріали XXXIII-ої Міжнародної науково-практичної конференції*

*(07 червня 2023 року, м. Паола (Мальта) дистанційно)*

**2023 р.**

**International Economic Institute s.r.o. (Jesenice, Czech Republic)**  
**Central European Education Institute (Bratislava, Slovakia)**  
**National Institute for Economic Research (Batumi, Georgia)**  
**Al-Farabi Kazakh National University (Kazakhstan)**  
**Institute of Philosophy and Sociology of Azerbaijan National Academy of Sciences**  
**(Baku, Azerbaijan)**  
**Batumi Navigation Teaching University (Batumi, Georgia)**  
**Regional Academy of Management (Kazakhstan)**  
**Public Scientific Organization "Ukrainian Assembly of Doctors of Sciences in**  
**Public Administration" (Kyiv, Ukraine)**  
**Public Organization Organization "Association of Scientists of Ukraine" (Kyiv, Ukraine)**  
**University of New Technologies (Kyiv, Ukraine)**  
**Interstate Consultants Engineers Guild (Kyiv, Ukraine)**  
**Institute of Education of the Republic of Azerbaijan (Baku, Azerbaijan)**

*within the Publishing Group "Scientific Perspectives"*

# **MODERN ASPECTS OF MODERNIZATION OF SCIENCE: STATUS, PROBLEMS, DEVELOPMENT TRENDS**

*Materials of the 33th International Scientific and Practical Conference*

*June 7, 2023, Paola (Malta)*

*Матеріали XXXIII-ої Міжнародної науково-практичної конференції  
(07 червня 2023 року, м. Паола (Мальта), дистанційно)*

УДК 001.3-048.35:0/9](06)  
С91

*Схвалено до друку Президією Громадської наукової організації «Всеукраїнська Асамблея докторів наук з державного управління» (Рішення № 63-23, від 02.06.2023)*



*Матеріали конференцій індексуються у міжнародній пошуковій системі Google Scholar*

#### **Організаційний комітет конференції:**

*І.В. Жукова – кандидат наук з державного управління, доцент; Є.О. Романенко – доктор наук з державного управління, професор, Заслужений юрист України; О.М. Непомнячий - доктор наук з державного управління, професор, Заслужений будівельник України; О.М. Макаренко - доктор медичних наук, професор; Маркета Павлова – директор Міжнародного економічного інституту (Чехія); Юрій Кійков - доктор інформатики, доктор технічних наук у галузі розвитку освіти (Чехія); Володимир Бачишин - доцент кафедри економіки (Словаччина); Гумейр Гусейн Ахмедов – доктор педагогічних наук, професор (Азербайджан); О.І. Дацій - доктор економічних наук, професор, Заслужений працівник освіти України; В.Л. Федоренко - доктор юридичних наук, професор, Заслужений юрист України; Петер Ошват - доцент юридичного факультету (Словаччина); Л.С. Ахметова - доктор історичних наук, професор політології, професор кафедри ЮНЕСКО (Казахстан); Бадрі Гечбаія - доктор економічних наук, професор, Асоційований професор Батумського державного університету ім. Шота Руставелі (Грузія).*

**Секретар:** *А.С. Ковальчук - здобувач ступеня доктора філософії (PhD).*

*Сучасні аспекти модернізації науки: стан, проблеми, тенденції розвитку: матеріали XXXIII Міжнародної науково-практичної конференції / за ред. І.В. Жукової, Є.О. Романенка. м. Паола (Мальта): ГО «ВАДНД», 07 червня 2023 р. 400 с.*

*У матеріалах XXXIII-ої Міжнародної науково-практичної конференції висвітлені оригінальні дослідницькі та оглядові розвідки з теоретичних та прикладних аспектів державного управління, права, економіки, історії, педагогіки, психології, техніки та інших галузей науки для їх інтеграції у європейський, світовий науковий простір.*

*Матеріали будуть корисними та цікавими науковцям, викладачам, педагогам-практикам, представникам органів державної влади та місцевого самоврядування, здобувачам вищої освіти, громадсько-політичним діячам, а, також, усім, хто цікавиться міжнародним досвідом реалізації інноваційних освітніх процесів.*

*Матеріали подані в авторській редакції. Відповідальність за зміст та орфографію матеріалів несуть автори.*

© автори, 2023

© Громадська наукова організація «Всеукраїнська Асамблея докторів наук, 2023

з державного управління», 2023

© Громадська організація «Асоціація науковців України», 2023

© Видавнича група «Наукові перспективи», 2023

**Максименко О.В., Кузнецова М.О., Літвін В.І., Цикало Б.М.** 258  
**РОЗВИТОК РЕАКЦІЇ ГПЕРЧУТЛИВОСТІ ЗАМЕДЛЕНОГО  
ТИПУ ПІД ЧАС ВЖИВАННЯ ТЮТЮНОВИХ ВИРОБІВ**

**Оберніхіна Н.В., Качковський О.Д., Броварець В.С.** 265  
**IN SILICO ДОСЛІДЖЕННЯ БІОЛОГІЧНОЇ СПОРІДНЕНОСТІ  
СПРЯЖЕНИХ АЗОТИСТИХ ГЕТЕРОЦИКЛІВ**

**СЕКЦІЯ 8.** 269  
**ГРОШІ, ФІНАНСИ І КРЕДИТ**

**Волкова О.В.** 269  
**ОРГАНІЗАЦІЯ РОБОТИ РИНКУ LIFE-СТРАХУВАННЯ  
ПІД ЧАС ВОЄННОГО СТАНУ**

**Мантач А.Д., Гаврилко Т.О.** 274  
**УПРАВЛІННЯ ФІНАНСОВИМИ РЕСУРСАМИ БАНКІВСЬКИХ  
УСТАНОВ УКРАЇНИ**

**Тимошенко М.В.** 279  
**ДЕРЖАВНИЙ БОРГ В УМОВАХ ВІЙНИ**

**СЕКЦІЯ 9.** 285  
**МІЖНАРОДНА ЕКОНОМІКА**

**Брездень М. В.** 285  
**ІНТЕГРАЛЬНЕ ОЦІНЮВАННЯ КРАЇН ЄВРОПИ ЗА  
ПОКАЗНИКАМИ ЗОВНІШНЬОЇ ТОРГІВЛІ ПОСЛУГАМИ**

**СЕКЦІЯ 10.** 291  
**ЕКОНОМІКА Й УПРАВЛІННЯ ПІДПРИЄМСТВОМ**

**Дмитришин В.С.**  
**ЩОДО МЕХАНІЗМІВ КОМЕРЦІАЛІЗАЦІЇ ІННОВАЦІЙНИХ  
ПРОДУКТІВ НАУКОВИХ УСТАНОВ**



**Оберніхіна Н.В.**

кандидат хімічних наук, доцент,  
доцент ЗВО кафедри медичної  
біохімії та молекулярної біології,  
*Національний медичний університет  
імені О.О.Богомольця  
м. Київ, Україна*

**Качковський О.Д.**

доктор хімічних наук,  
старший науковий співробітник  
відділу хімії біоактивних азотовмісних  
гетероциклічних основ,  
*Інститут біоорганічної хімії та нафтохімії  
імені В.П. Кухаря,  
Національна академія наук України,  
м. Київ, Україна*

**Броварець В.С.**

доктор хімічних наук, професор,  
завідувач відділу хімії біоактивних  
азотовмісних гетероциклічних основ,  
*Інститут біоорганічної хімії та нафтохімії  
імені В.П. Кухаря,  
Національна академія наук України,  
м. Київ, Україна*

***IN SILICO* ДОСЛІДЖЕННЯ БІОЛОГІЧНОЇ  
СПОРІДНЕНОСТІ СПРЯЖЕНИХ АЗОТИСТИХ  
ГЕТЕРОЦИКЛІВ**

Спряжені азотисті гетероцикли є основним ядром таких природних сполук, як пурини та піримідини, вітаміни,





амінокислотні залишки білкових молекул, деякі нейромедіатори. Тому ці типи  $\pi$ -спряжених гетероциклічних систем використовують як основні платформи для розробки нових фармакологічно активних сполук, одним з первинних етапів якої є моделювання їх ефективності (біологічної спорідненості) [1]. Здатність азотистих гетероциклів (Het) утворювати стійкі комплекси з біомолекулами (BioM) залежить від донорно-акцепторних властивостей обох компонентів комплексу [Het-BioM] і позначається як їх біологічна спорідненість. Раніше [2,3] було запропоновано кількісно оцінювати донорно-акцепторні властивості компонентів комплексу за параметром  $\phi_0$ , який чисельно показує ступінь електронодонорності досліджуваних сполук. Як представник донорних гетероциклів розглянуто 1,3-імідазол, а гетероциклом акцепторної природи є 1,3-піримідин.

Обидва гетероцикли можуть утворювати комплекси [Het-BioM] як за механізмом  $\pi$ -стекової взаємодії, так і за механізмом водневих зв'язків. Гетероциклічні ароматичні молекули імідазолу та піримідину є  $\pi$ -спряженими планарними системами, отже, здатні утворювати комплекси [Het-BioM] за механізмом  $\pi$ -стекингової взаємодії ( $\pi$ - $\pi$ ) комплекси) із амінокислотними залишками білкових молекул, такими як фенілаланін, тирозин, триптофан. Для моделювання  $\pi$ - $\pi$  комплексів між гетероциклами та фенілаланіном як електронейтральним  $\pi$ -спряженим амінокислотним залишком в якості модельної молекули використовували Ph-CH<sub>3</sub> ( $\phi_0=0,51$ ).

Як імідазол так і піримідин містять атоми нітрогену з неподіленою електронною парою поза загальною системою  $\pi$ -спряження, вона може бути донором електронів при утворенні комплексу [Het-BioM] за механізмом водневого зв'язку



([H-V] комплекси). Для моделювання [H-V] комплексів між досліджуваними молекулами та групою HO- як донором протонів в біологічних системах в якості модельної молекули використовували HO-CH<sub>3</sub> ( $\varphi_0=0,50$ ). *In silico* дослідження стабільності комплексів [Het-BioM], утворених за різними механізмами, представлені в таблиці.

Таблиця.

**Типи молекулярних орбіталей (МО),  $\varphi_0$  та енергії [Het-BioM] комплексів, утворених за різними типами механізмів.**

Сполуки	тип МО	$\varphi_0$	E [Het-BioM], ккал/моль	
			$\pi$ -стек	водн. зв'язки
1,3-імідазол	$\pi$ -МО	0,58	-3,82	-
	n-МО	0,52	-	-7,44
1,3-піримідин	$\pi$ -МО	0,40	-4,99	-
	n-МО	0,44	-	-9,31

Як видно з таблиці, комплекси [Het-BioM], утворені між залишками амінокислот білкових молекул та акцепторним 1,3-піримідином як за механізмом  $\pi$ -стекової взаємодії, так і за механізмом водневих зв'язків, стабільніші від подібних комплексів з 1,3-імідазолом ~ на 1 ккал/моль та ~ на 2 ккал/моль відповідно. Тож, для розробки потенційно активних фармакофорів як основну гетероциклічну платформу варто використовувати піримідин, так як саме така гетероциклічна  $\pi$ -спряжена система проявила активнішу біологічну спорідненість.

**Список використаних джерел:**

1. Obernikhina, N. V., Kachaeva M. V., Kachkovsky O. D., Brovarets V. S. *In silico* study of conjugated nitrogen heterocycles





affinity in their biological complexes *Chemistry of Heterocyclic Compounds*. 2022. Vol. 58 (8/9). P. 412–420.

2. Obernikhina N., Kachaeva M., Shchodryi V., Prostota Ya., Kachkovsky O., Brovarets V., Tkachuk Z., Topological Index of Conjugated Heterocyclic Compounds as Their Donor/Acceptor Parameter. *Polycyclic Aromatic Compounds*. 2020. Vol. 40(4). P.1196-1209

3. Obernikhina N., Pavlenko O., Kachkovsky A., Brovarets V. Quantum-Chemical and Experimental Estimation of Non-Bonding Level (Fermi Level) and  $\pi$ -Electron Affinity of Conjugated Systems. *Polycyclic Aromatic Compounds*. 2021. Vol.41(10) P. 2110-2119.



*Матеріали XXXIII-ої Міжнародної науково-практичної конференції*

*(07 червня 2023 року, м. Паола (Мальта), дистанційно)*

# **СУЧАСНІ АСПЕКТИ МОДЕРНІЗАЦІЇ НАУКИ: СТАН, ПРОБЛЕМИ, ТЕНДЕНЦІЇ РОЗВИТКУ**

Підписано до друку 02 червня 2023 р.  
Формат 60х90/8. Папір офсетний.  
Друк офсетний. Гарнітура Times New Roman.  
Ум. друк. арк. 8,2. Наклад 100 прим.

*Видавець: Громадська наукова організація «Всеукраїнська асамблея докторів наук з державного управління» Свідоцтво серія ДК No4957 від 18.08.2015 р., Андріївський узвіз, буд.11, оф 68, м. Київ, 04070.*

Надруковано рекламним агентством  
«GoToPrint» Адреса, Україна, Київська обл.,  
м. Київ, вул. Льва Толстого, 63  
e-mail: gotoprint@gmail.com