УДК 547.995

КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ГЕОМЕТРІЇ І ЕЛЕКТРОННОЇ СТРУКТУРИ ГЛЮКОЗАМІНУ ТА ГЛЮКОЗИ МЕТОДАМИ КВАНТОВОЇ ХІМІЇ

Бараков Р.Ю.,
Солодовнік Т.В., *к.х.н., доцент,*
Черкаський державний технологічний університет

Мінаєв Б.П., *д.х.н., професор,*
Мінаєва В.О., *к.х.н., доцент*
Черкаський національний університет ім. Б. Хмельницького

*Проведено сравнительное исследование геометрии и электронной структуры D-глюкозамина и D- глюкозы методом функционала плотности B3LYP в базисе 6–31 G**. Были рассчитаны длины связей, валентные и двугранные углы, суммарные энергии, энергии граничных орбиталей (ВЗМО и НВМО), дипольные моменты и электростатические заряды. Было установлено, что для глюкозамина характерен ряд особенных физических и химических свойств и это связано с присутствием активных аминогрупп в его молекуле.*

*Geometry and electronic structure of D-glucosamine and D-glucose are comparatively studied with the help of B3LYP density-functional method in 6–31G** basis. Bond distances, valent and dihedral angles, total energy, frontier orbitals (HOMO and LUMO), dipole moments and electrostatic charges are calculated. It is established, that glucosamine is characterized by a number of peculiar physical and chemical properties and it is connected with the presence of active aminogroups in its structure.*

Вступ

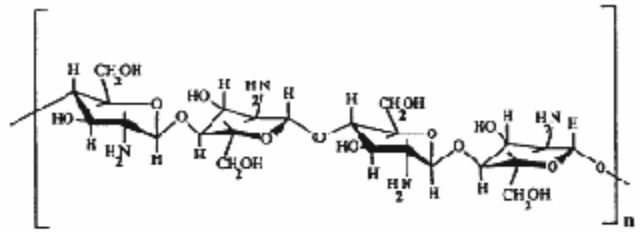
Бурхливий прогрес обчислюваної техніки та розвиток програмного забезпечення призвели до наукової революції у галузі комп'ютерного моделювання в хімії. Це дало можливість теоретично досліджувати складні молекули, інтермедіати, перехідні стани у хімічних реакціях, спектральні та енергетичні характеристики речовин. Дослідні дані показують, що результатам квантово-хімічних та молекулярно-динамічних розрахунків цілком можливо довіряти і що їх експериментальна перевірка не завжди обов'язкова.

Існуючі квантово-хімічні обчислювальні засоби дозволяють проводити розрахунки для природних амінополісахаридів – хітину та хітозану.

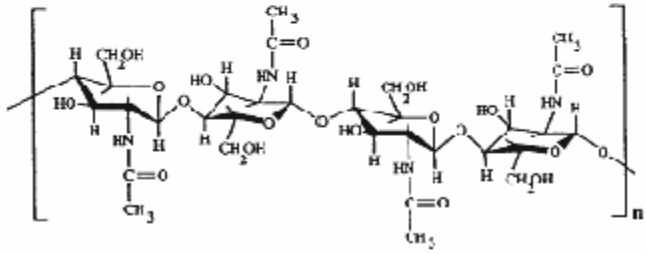
Хітин та хітозан завдяки своїм унікальним фізико-хімічним, фізіологічним, сорбційним властивостям знайшли застосування у різноманітних галузях народного господарства. Тому ці біополімери потребують детального вивчення, зокрема актуальним на сьогоднішній день є дослідження їх геометрії та електронної структури.

Аналіз джерел досліджень і публікацій

Хітозан – природний біополімер, деацетильоване похідне хітину, яке складають молекули D-глюкозаміну, сполучені β-(1,4)-глюкозидними зв'язками (рис. 1).



а Хітозан



б Хітин

Рис. 1. Структурні формули хітозану (а), хітину (б)

Хітозан як природний біополімер виявлений тільки у мукорових грибах [1]. На сьогоднішній час хітозан є маловивченою речовиною. Це пояснюється тим, що хітозан – не індивідуальна сполука, а сукупність речовин, які мають різний ступінь деацетилювання, а також важкістю добування хітозану з високим вмістом продукту.

Хітозан добувають з хітину (реакція деацетилювання), а також з мукорових і деяких вищих (Agaricus campestris і A. bisporus) грибів [2]. В основі методів добування хітозану з хітину в присутності лугу покладена реакція деацетилювання (рис. 2).

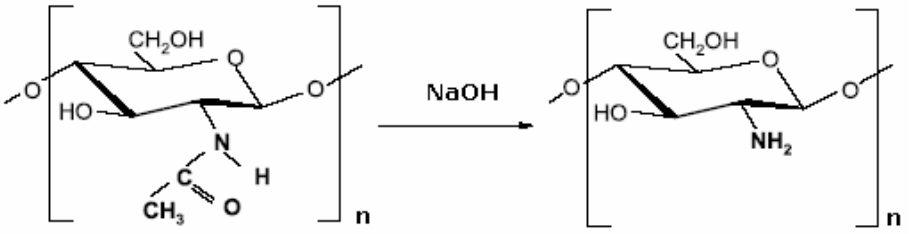


Рис. 2. Схематичне зображення реакції деацетилювання

Наявність гідроксильної і аміногрупи надає хітозану специфічні фізико-хімічні та структурні властивості.

Завдяки цьому хітозан знаходить застосування у багатьох галузях народного господарства, таких як медицина (пригнічує ріст ракових кліток; підвищує імунітет організму; покращує процеси регенерації клітин та тканин; знижує рівень холестерину, сечової кислоти та глюкози в крові; адсорбує та виводить з організму радіонукліди, солі важких металів; покращує обмін речовин в підшлунковій залозі та печінці); целюлозно-паперова промисловість (підвищення міцності паперу; виготовлення картону, волокон, тканин); харчова промисловість (виготовлення харчових домішок, ентеросорбентів – засобів очистки організму через органи травлення); косметика (виготовлення парфумерних виробів, шампунів, лосьйонів, гелів); сільське господарство (стимулятор росту рослин; нетоксичний засіб захисту насіння та ін) [3].

Актуальність даної наукової роботи пояснюється обмеженою кількістю робіт з дослідження структури природного аміно- полісахариду – хітозану теоретичними методами, хоча французькими вченими в роботі [4] досліджувалась можлива взаємодія між купром (II) іоном та мономерами хітину та хітозану. Геометрія та теплота утворення досліджуваних комплексів була розрахована методом функціоналу густини. Розглядалась можливість координації Cu^{2+} з різними атомами у молекулах D-глюкозаміну та N-ацетил-D-глюкозаміну. Розрахунки теплоти утворення підтвердили стійкість комплексу, в якому Cu^{2+} координується з атомом азоту аміногрупи за допомогою донорно-акцепторного зв'язку.

Постановка завдання

Для вивчення фізичних, хімічних, сорбційних властивостей хітозану велике значення має дослідження його структури. В зв'язку з цим метою даної роботи є аналіз результатів розрахунку геометрії та електронної структури мономеру хітозану – D-глюкозаміну напівемпіричними методами квантової хімії (PM3, MNDO) та функціоналу густини (B3LYP/6–31G**) і порівняння їх з відповідними результатами для D-глюкози. З метою спрощення розрахунків та зменшення їх тривалості був розрахований мономер хітозану – D-глюкозамін, який повністю визначає його властивості.

Методи дослідження

Для дослідження геометрії та електронної структури мономеру хітозану D-глюкозаміну були використані напівемпіричні методи квантової хімії та метод функціоналу густини.

Напівемпіричні методи вирішують рівняння Шредінгера для атомів і молекул з використанням певних наближень і спрощень. Всі методи цієї групи характеризуються тим, що: розрахунок ведеться тільки для валентних електронів; не враховуються інтеграли певних взаємодій; використовуються стандартні неоптимізовані базисні функції електронних орбіталей і деякі параметри, які одержані в експерименті (потенціал іонізації, енергія дисоціації, енергія зв'язку). Експериментальні параметри усувають необхідність розрахунків ряду величин і корегують помилкові результати наближень.

MNDO (Modified Neglect of Diatomic Overlap) – метод модифікованого нехтування двохатомним перекриванням був розроблений у 1977 році. Даний метод є незалежним варіантом наближення NDDO. Він не дає систематичних похибок, як метод MINDO/3, дає більш точні значення валентних кутів та більш правильну послідовність рівнів молекулярних орбіталей, оскільки враховує просторову направленість p-орбіталей при розрахунку двоелектронних інтегралів. Це дає змогу коректного опису відштовхування неподілених електронних пар.

PM3 (parametric method 3) – нова версія наближення NDDO, в якій оптимізовано деякі параметри і використано MNDO – гамільтоніан.

Цей метод був розробленний у 1989 році Стюартом. РМ3 є вдосконаленою версією методу АМ1. РМ3 відрізняється від АМ1 тільки величинами параметрів. Параметри для РМ3 були одержані порівнянням великого числа і виду експериментів з результатами розрахунків. Як правило, нековалентні взаємодії в методі РМ3 є менш розштовхуючими, ніж в АМ1 [5].

Теорія функціонала густини (density functional theory, DFT) базується на класичній моделі Томаса-Фермі, та теоремі Хоенберга–Кона. Ця теорема ґрунтується на тому, що енергія основного стану є функціоналом лише електронної густини [6]

$$E = E[\rho(r)], \quad (1)$$

тобто кожній заданій електронній густині (функції $\rho(r)$) відповідає своє, і тільки одне значення енергії. В 1987 році Кон запропонував конкретний вид функціонала, який добре описував обмінно-кореляційну частину енергії за рахунок підбору параметрів на основі співставлення з експериментальними даними.

Комп'ютерні розрахунки методом функціонала густини B3LYP в базисі 6–31G** були проведені в Стокгольмському центрі фізики, астрономії і біотехнології (SCFAB). Вони більш точні, ніж неемпіричні і напівемпіричні, але вимагають застосування потужної обчислюваної техніки.

Результати та обговорення

Результати розрахунків довжини зв'язків наведені в табл. 1, валентних кутів – в табл. 2, двогранних кутів – в табл. 3. Конформації молекул глюкозаміну та глюкози, оптимізованих методом РМ3, наведені на рис. 3.

Таблиця 1

Довжини зв'язків (Å) у молекулах D-глюкозаміну та D-глюкози

Зв'язок	Метод розрахунку				Експеримент
	MNDO	PM3		B3LYP/6-31G**	
	Глюкозамін	Глюкозамін	Глюкоза	Глюкозамін	
$C^1 – C^2$	1,581	1,552	1,560	1,541	1,54
$C^2 – C^3$	1,572	1,546	1,549	1,535	1,54
$C^3 – C^4$	1,590	1,554	1,555	1,519	1,54
$C^4 – C^5$	1,586	1,552	1,555	1,529	1,54
$C^5 – C^6$	1,577	1,546	1,546	1,535	1,54
$C^1 – H^{11}$	1,134	1,117	1,115	1,099	1,09
$C^2 – H^{10}$	1,127	1,120	1,118	1,096	1,09
$C^3 – H^9$	1,125	1,120	1,119	1,102	1,09
$C^4 – H^8$	1,126	1,124	1,124	1,100	1,09
$C^5 – H^7$	1,125	1,117	1,117	1,098	1,09
$C^1 – O^{12}$	1,408	1,404	1,407	1,413	1,42
$C^1 – O^{16}$	1,395	1,403	1,392	1,416	1,42
$O^{16} – H^{23}$	0,948	0,949	0,957	0,967	0,96

Таблиця 2

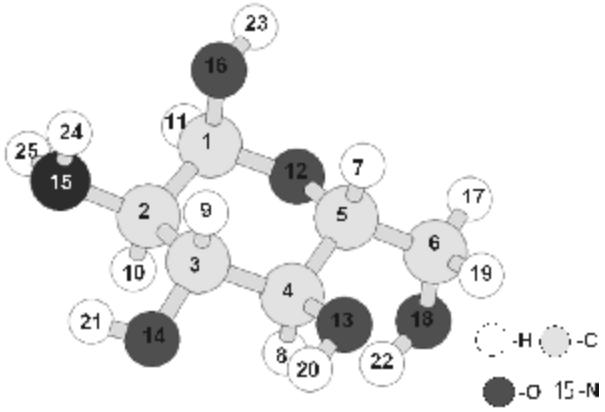
Валентні кути (градус) у молекулах D-глюкозаміну та D-глюкози

Назва валентного кута	Метод розрахунку			
	MNDO	PM3		B3LYP/6-31G**
	Глюкозамін	Глюкозамін	Глюкоза	Глюкозамін
$C^1–C^2–C^3$	111,16	110,77	108,69	110,21
$C^2–C^3–C^4$	110,67	109,92	110,12	109,33
$C^3–C^4–C^5$	112,11	110,54	111,04	109,35
$C^4–C^5–C^6$	115,02	111,62	111,57	112,43
$C^1–C^2–H^{10}$	105,27	107,36	110,92	107,10
$C^3–C^2–H^{10}$	108,39	108,65	110,25	107,01
$C^5–C^6–H^{17}$	109,07	111,60	111,56	108,25
$O^{16}–C^1–O^{12}$	108,58	107,68	96,78	112,46
$C^2–C^1– O^{16}$	112,11	109,57	112,29	106,91
$O^{12}–C^1–H^{11}$	104,47	101,66	113,52	104,21
$O^{16}–C^1–H^{11}$	111,37	111,85	109,01	110,62
$C^1–O^{16}–H^{23}$	112,23	108,08	105,01	107,47
$H^{25}–N^{15}–H^{24}$	104,44	109,36		106,87

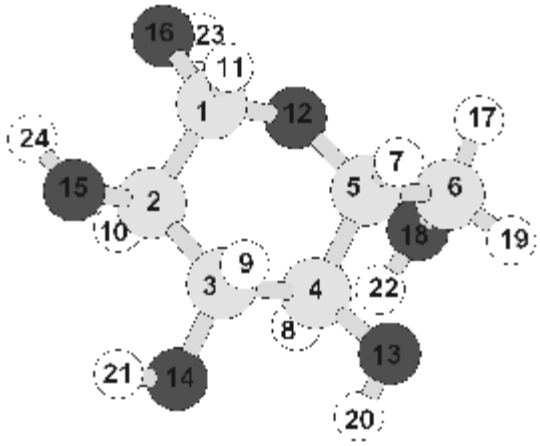
Таблиця 3

Двогранні кути (градус) у молекулі D-глюкозаміну

Назва двогранного кута	Метод розрахунку		
	MNDO	PM3	B3LYP/6-31G**
C1–C2–C3 – C4	-49,74	-50,73	- 52,92
C2–C3–C4 – C5	48,82	53,37	58,54
C3–C4 –C5– C6	-162,12	-171,93	178,59
C5–C4–C3 – H9	-70,28	-68,52	- 60,61
C4–C3–C2– H10	65,49	66,97	63,20
H8–C4–C3 – H9	170,95	170,13	-177,76
H7–C5–C4 – H8	-165,73	-170,92	175,56
C1–O12–C5– C4	50,08	53,34	60,50
C3–C4–C5– O12	-46,05	-53,57	-60,70
C5–C4–C3– O14	168,63	174,17	179,35
C2–C3–C4–O13	171,16	170,9	179,20



а)



б)

Рис. 3. Оптимізовані конформації молекул D-глюкозаміну (а) та D-глюкози (б)

Порівнюючи експериментальні значення довжин зв'язків [7] зі значеннями, отриманими у ході розрахунків, можна говорити про те, що найбільш точні дані дає метод функціонала густини. З напівемпіричних методів точнішим є PM3, тому саме він був обраний для розрахунків геометрії та електронної структури глюкози. Заміна аміногрупи на гідроксильну групу приводить до збільшення довжини зв'язків $C^1 – C^2$, $C^2 – C^3$ (порівнюючи дані PM3) та зменшення зв'язку $C^2 – H^{10}$. Різні значення довжини зв'язків $C^1 – H^{11}$, $C^1 – O^{12}$, $C^1 – O^{16}$, $O^{16} – H^{23}$ можна пояснити тим, що розрахунки напівемпіричними методами проводилися для D-глюкозаміну у α-формі, а для D-глюкози у β-формі. Такий вибір стереоізомерів обумовлений конкретними експериментальними задачами, які ми вирішували.

Розраховані значення валентних кутів у молекулах глюкозаміну та глюкози (табл. 2) близькі до 109°. Це свідчить про те, що всі атоми вуглецю в досліджуваних молекулах знаходяться в sp^3 гібридизації. Відхилення валентних кутів від 109°28´ пояснюється кулонівськими силами відштовхування та електронегативністю атомів, учасників зв'язку. Дані розрахунків валентних кутів для глюкозаміну за обраними методами досить добре узгоджуються між собою. Кути $C^5 – C^6 – H^{17}$, $H^{25} – N^{15} – H^{24}$, $O^{12} – C^1 – H^{11}$, обчислені за методами PM3 та B3LYP/6-31G**, відрізняються між собою на 2,5-3°, а кут $O^{16} – C^1 – O^{12}$ на 5°. Заміна аміногрупи на гідроксильну групу та α на β форму пояснюється значною відмінність (за методом PM3) у значеннях валентних кутів $C^1– C^2 – C^3$, $C^1 – C^2 – H^{10}$, $C^3 – C^2 – H^{10}$, $C^2 – C^1 – O^{16}$ для молекул глюкозаміну та глюкози.

Важливим геометричним параметром молекули є двогранний кут. Двогранний кут (кут повороту, кут кручення, торсійний кут) – кут повороту суміжних зв'язків один відносно одного. Двогранний кут визначає, головним чином, розташування суміжних зв'язків в просторі та впливає на конформацію усієї молекули. Значення двогранних кутів $C^1 – C^2 – C^3 – C^4$, $C^2 – C^3 – C^4 – C^5$, $C^1 – O^{12} – C^5 – C^4$ підтверджують те, що глюкозамін та глюкоза мають конформацію крісла. За двогранними кутами можна визначити групу атомів в молекулі, яка лежить в одній площині або різних площинах. Значення двогранних кутів (розрахованих методом функціоналу густини) $C^3 – C^4 – C^5 –$

C^6, $C^5 – C^4 – C^3 – O^{14}$, $C^2 – C^3 – C^4 – O^{13}$ близькі до 180°. Кожна з цих груп атомів в молекулі глюкозаміну лежить приблизно в одній площині. Тоді як значення двогранних кутів $C^5 – C^4 – C^3 – H^9$, $C^4 – C^3 – C^2 – H^{10}$ та ін. значно відрізняється від 180° і це означає, що хоча б один з атомів в кожній групі лежить в іншій площині.

Розраховані значення ефективних зарядів на атомах глюкозаміну та глюкози містяться в табл. 4.

Таблиця 4

Ефективні заряди на атомах (одиниця заряду електрона) в молекулах D-глюкозаміну та D-глюкози

Символи і номери атомів	Метод розрахунку			
	MNDO	PM3		B3LYP/6-31G**
	Глюкозамін	Глюкозамін	Глюкоза	Глюкозамін
C1	0,295	0,197	0,194	0,361
C2	0,047	- 0,152	- 0,010	0,005
C6	0,162	0,065	0,063	0,042
O12	- 0,377	- 0,277	- 0,289	- 0,509
O13	- 0,321	- 0,310	- 0,309	- 0,582
O16	- 0,323	- 0,345	- 0,333	- 0,538
H10	0,006	0,093	0,075	0,114
N15	- 0,253	- 0,033		- 0,623
H19	- 0,008	0,046	0,048	0,097

Аміногрупа (у глюкозаміну) та гідроксильні групи (у глюкози та глюкозаміну) визначають розподіл електронної густини, який обумовлює реакційну здатність молекул. Функціональна група $–NH_2$ у молекулі глюкозаміну проявляє електроноакцепторні властивості (негативний індукційний (-I) ефект).

Внаслідок проявлення -I ефекту електронна густина зміщується від атому C^2 (δ = 0,005 е за методом B3LYP/6-31G**) до атому N^{15} (δ = -0,623 е). Електроноакцепторні властивості та -I ефект у молекулах глюкозаміну та глюкози виявляють усі групи –ОН. Як результат виявлення -I ефекту і зміщення електронної густини атоми Оксигену набувають частково негативних зарядів, а атоми Карбону – часткових позитивних зарядів. Відсутність в молекулах глюкозаміну та глюкози будь якого р-π-спряження пояснюється відсутністю електронодонорних властивостей у замісників $–NH_2$ та –ОН. Серед гідроксильних груп у обох молекулах найбільшу активність має глікозидний гідроксил при C^1. Про це свідчить значення часткового заряду на атомі O^{16} за методом РМ3. Для глюкозаміну він становить -0,345 е, а для глюкози -0,333 е. Підвищена реакційна здатність глікозидного гідроксилу пояснюється впливом етерового атома кисню, який зміщує частково електрони суміжних С – О зв'язків на себе. Таке зміщення електронної густини збільшує полярність зв'язку між атомами вуглецю і ОН- групою. Значення часткового позитивного заряду C^1 для глюкозаміну та глюкози за усіма методами значно більше порівняно з іншими атомами вуглецю. Це підтверджує активність гідроксильної групи глюкозаміну при C^1 у реакціях з одноосновними кислотами, алкілюючими та ацилюючими агентами.

Величина дипольного моменту та деякі фізико-хімічні параметри досліджуваних молекул містяться в табл. 5.

Дипольний момент є векторною величиною і направлений від центру ваги позитивного заряду до центру ваги негативного заряду. Вектор дипольного моменту визначений для обох молекул за допомогою напівемпіричних методів. Молекула глюкозаміну має більше значення дипольного моменту, ніж молекула глюкози і тому є більш полярною та має вищу реакційну здатність у реакціях за гетерогенним (іонним) механізмом.

Енергії вищої зайнятої молекулярної орбіталі (ВЗМО) та нижчої вільної молекулярної орбіталі (НВМО) в молекулі глюкозаміну більші, ніж відповідні значення в молекулі глюкози за методом РМ3. Оскільки енергія НВМО в обох молекулах позитивна, то глюкозамін та глюкоза повинні мати нуклеофільні властивості і від'ємну електронну спорідненість. ВЗМО та НВМО для обох молекул є σ-молекулярними орбіталями з різними зв'язуючими і антизв'язуючими властивостями. ВЗМО глюкозаміну локалізована, головним чином, вздовж зв'язків $C^1 – C^2$, $C^2 – C^3$ і має зв'язуючий характер (рис. 5). Вона також значною мірою локалізована на 2р-орбіталі аміногрупи, котра, в свою чергу, спряжена зі зв'язком $C^2 – C^3$ і включає також зв'язуючий характер NH-зв'язків. Таким чином, властивості глюкозаміну як окиснюваної речовини (або як відновника), визначені відривом електрона з ВЗМО, зводяться не тільки до відриву електрона неподіленої пари аміногрупи але й значною мірою залежать від вищевказаної делокалізації ВЗМО. Крім того можна відмітити невелику участь 2р-орбіталі атома O^{12} в делокалізації даної ВЗМО (рис. 4).

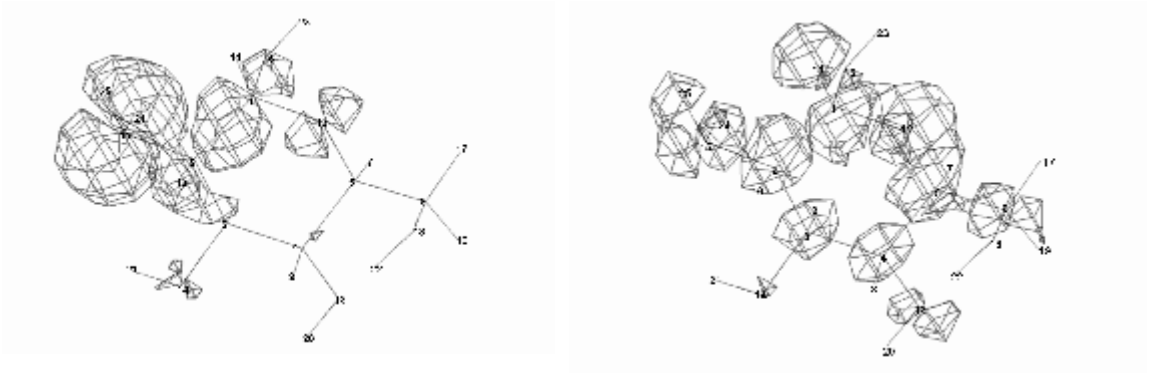
ВЗМО молекули глюкози локалізована значною мірою вздовж всього гетероциклічного кільця та на замісниках при атомах C^1, C^2, C^3, O^{12}. Групи O^{13} – H^{20}, O^{18} – H^{22}, а також $–CH_2OH$ група не беруть участь в формуванні ВЗМО (рис. 5). Наші розрахунки свідчать про те, що окисний потенціал півхвилі глюкозаміну значно менший, ніж глюкози, що співпадає з експериментом. Вигляд НВМО схожий для обох молекул.

Таблиця 5

Фізико-хімічні параметри молекул D- глюкозаміну та D- глюкози

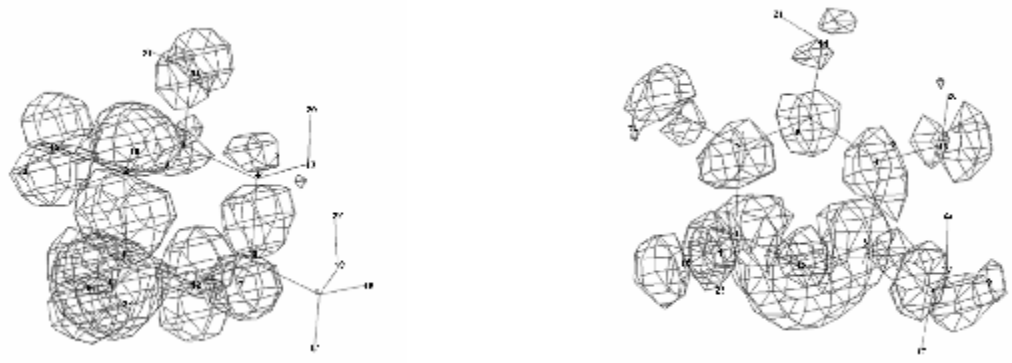
Параметр	Метод розрахунку			
	MNDO	PM3		B3LYP/6-31G**
	Глюкозамін	Глюкозамін	Глюкоза	Глюкозамін
Езаг,ккал/ моль	-58629	-58642,8	-61321	
Езаг.,кДж/ моль	-245467	-245525	-256739	
ΔHf,ккал/моль	-208,387	-222,391	-269,989	
ΔHf,кДж/ моль	-872,47	-931,11	-1130,39	
μ, *D*	2,893	2,591	1,637	3,385
E(ВЗМО), еВ	-9,4183	-9,9968	-10,8634	-6,6790
E(НВМО), еВ	2,1414	2,1835	2,0473	1,5795
Ширина енергетичної щілини ΔE, еВ	11,5597	12,1803	12,9107	8,2585

НВМО глюкозаміну та глюкози локалізована по всій молекулі, крім деяких атомів H^{17}, H^{20}, H^{21}, H^{22}. При цьому НВМО є розпушуючою по зв'язках кільця в обох молекулах, а також і по зв'язках з замісниками (рис. 4 і 5).



а) **б)**

Рис.4. Вигляд граничних орбіталей молекули D-глюкозаміну: ВЗМО (а); НВМО (б)

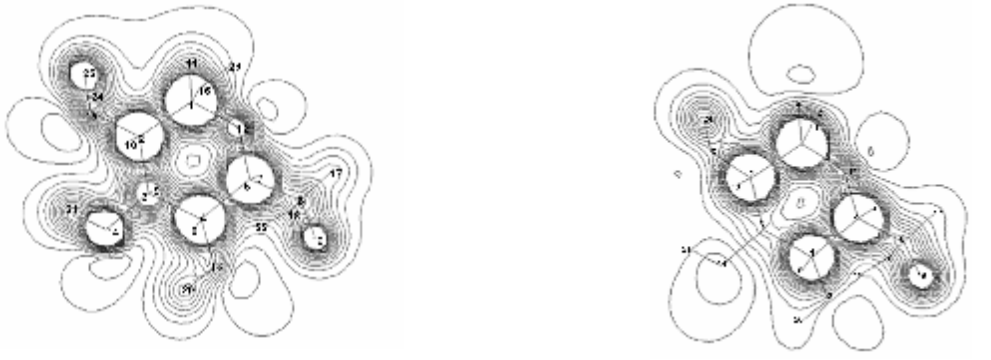


а) **б)**

Рис. 5. Вигляд граничних орбіталей молекули D-глюкози: ВЗМО (а); НВМО(б)

Був розрахований в наближенні РМ3 розподіл електростатичного потенціалу для молекул глюкозаміну та глюкози (рис. 6). Області негативного потенціалу, які обумовлені неподільними електронними парами атомів Оксигену та Нітрогену (для глюкозаміну), зображені у вигляді сфер червоного кольору поблизу цих атомів. Поблизу атомів O^{18} та O^{16} (для глюкозаміну) негативний потенціал не спостерігається внаслідок знаходження їх в іншій площині, але він існує. Можна

говорити про те, що при взаємодії молекул з полярним розчинником катіони будуть прагнути підійти до області негативного потенціалу, а аніони, навпаки, до позитивної області.



а) **б)**

Рис.6. Розподіл електростатичного потенціалу в молекулах: а) D-глюкозаміну; б) D-глюкози

Висновки

Дослідивши геометрію та електронну будову глюкозаміну і глюкози напівемпіричними методами та методом функціонала густини, можна стверджувати, що на величину довжин зв'язків та валентних кутів впливає заміна аміногрупи на гідроксильну групу а також заміна α-форми на β; хімічна і біологічна активність глюкозаміну та глюкози пояснюється наявністю в їх структурі функціональних груп $–NH_2$ та –ОН та частковими зарядами на атомах; молекула глюкозаміну характеризується більшим значенням дипольного моменту, ніж молекула глюкози і тому є більш полярною та має вищу реакційну здатність у реакціях за гетерогенним (іонним) механізмом; для молекули глюкозаміну характерна більш позитивна енергія НВМО, тому і нуклеофільні властивості більш виражені, ніж у молекули глюкози; інформацію про напрямки взаємодії досліджуваних молекул з розчинником, а також розподіл негативного та позитивного потенціалів дає карта електростатичного потенціалу.

Отже, можна стверджувати, що заміна гідроксильної групи в структурі глюкози на аміногрупу надає глюкозаміну своєрідних фізичних, хімічних та деяких інших властивостей, які широко використовуються в різних галузях господарства. В подальшому планується проводити роботу по дослідженню похідних хітину і хітозану.

ЛІТЕРАТУРА

1. Bartnicki-Garcia S., Nickerson W.J. Isolation, composition and structure of cell walls of filamentous and yeast-like forms of Mucor rouxii // Biochim. et biophys. acta. – 1962. – 58. – P. 102–119.
2. Mima S., Miya M., Iwamoto R., Yoshikawa S. // J. Appl. Polym. Sci. – 1983. – 5, 28. – P. 1909–1917.
3. Muzzarelli R.A.A. Chitin. – Oxford: Pergamon Press, 1977. – 309 p.
4. Terreux R., Domard M., Viton C., Domard A. Interaction study between copper II ions and chitosan residues by DFT calculation// Advances in Chitin science, Vol.VIII. Henryk Struszczyk, Alain Domard, Martin G. Peter and Henryk Pospieszny. Eds.: Institute of Plant Protaction. – Poznan, Poland, 2005. – P. 390–394.
5. Stewart J.J.P. Optimization of Parameters for Semi-Empirical Methods // J. Comp. Chem. – 1989. – № 10. – P. 221.
6. Степанов Н.Ф. Квантовая механика и квантовая химия. – М.: Мир, 2001. – С. 319–325.
7. Butusov K.P. De Broglie wave physics // New Ideas in Natural Sciences: Proceedings of International Conference. Part I. Physics. – St.-Petersburg, 1996.

Бараков Р.Ю., студент кафедри загальної хімії Черкаського державного технологічного університету

Солодовнік Т.В., к.х.н., доцент кафедри загальної хімії Черкаського державного технологічного університету

Мінаєв Б.П., д.х.н., професор кафедри органічної хімії Черкаського національного університету ім. Б. Хмельницького

Мінаєва В.О., к.х.н., доцент кафедри загальної хімії Черкаського національного університету ім. Б. Хмельницького