

ВИЗНАЧЕННЯ ВМІСТУ ФОСФАТ ЙОНІВ У ПРИРОДНІЙ ВОДІ

Природна вода – предмет постійної уваги, оскільки вона визначає якість життя людей та біорізноманіття. При проведенні моніторингу води визначається низка показників органолептичні (смак, запах, прозорість, кольоровість), фізико-хімічні (рН, жорсткість, окиснюваність, вміст певних іонів, зокрема хлоридів, нітратів та ін.) і біологічні. Одним з фізико-хімічних показників, до якого останнім часом прикута особлива увага екологів, є концентрація фосфат іонів. Це пов'язано з тим, що накопичення фосфат іонів у природній воді може сприяти бурхливому розростанню водних рослин, зокрема синьо-зелених водоростей, що призводить до зниження концентрації розчиненого кисню у воді, загибелі риби та інших гідробіонтів. З надлишком зазначених іонів пов'язане явище евтрофікації – цвітіння води.

Мета роботи – визначити вміст фосфат іонів у зразках природної води відібраних на території Ічнянського національного природного парку.

Метод дослідження – фотоколориметричний з використанням амоній молібдату [1]. Одержані дані представлені в таблиці, і свідчать про відсутність перевищення нормованого показника (3,5 мг/дм³), затвердженого Міністерством захисту довкілля та природних ресурсів України (Наказ №173 від 05.03.2021 р.).

Таблиця. Концентрація фосфат йонів у зразках природної води

№ зразка	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
C(PO ₄ ³⁻), мг/дм ³	0,32	1,37	0,53	3,37	1,90	1,90	1,58	2,95	0,21	2,07	3,17

В той же час, одержані значення для різних зразків води з гідрологічних об'єктів парку вказують на актуальність постійного моніторингу якості води.

Список використаних джерел

1. Стрижак С. В. Фотоколориметричні методи аналізу: навчальний посібник. Полтава: ПНПУ імені В. Г. Короленка, 2023. 31 с.

Карасьова В. І., Бондар О. С.

КВАНТОВО-ХІМІЧНІ ДЕСКРИПТОРИ ТА ЇХ ЗАСТОСУВАННЯ У ПРОГНОЗУВАННІ БІОЛОГІЧНОЇ АКТИВНОСТІ ВТОРИННИХ АМІНІВ З ЦИКЛІЧНИМИ ЗАМІСНИКАМИ

Гетероциклічні сполуки є важливими об'єктами наукових досліджень, та привертають значну увагу завдяки своїй високій біологічній активності, яка зумовлює їх широке застосування для створення фармакологічних препаратів. Особливий науковий інтерес становлять похідні з триазольним і азепінієвим фрагментами, що характеризуються протисудомною, анксиолітичною, анальгезуючою та протизапальною дією [1], тож є перспективними для досліджень у фармацевтичній хімії.

Мета роботи: пошук кореляційних залежностей між біологічною активністю та квантово-хімічними характеристиками молекул вторинних амінів з циклічними замісниками.

У роботі було досліджено N-арил-N-(6,7,8,9-тетрагідро-5H-[1,2,4]триазоло[4,3-а]азепін-3-ілметил)-аміни, з різними замісниками у фенільному фрагменті: без замісника (сполука 1), -CH₃ (сполука 2), -OCH₃ (сполука 3), -F (сполука 4), -Cl (сполука 5), -I (сполука 6). Речовини синтезовано та надано для дослідження співробітником ТОВ НВП «Укроргсинтез» Макеєм О.П.

Розрахунок квантово-хімічних параметрів проведено у програмі Chem3D (ChemOffice), а саме: розподіл зарядів на атомах, енергія вищої зайнятої молекулярної орбіталі (E_{HOMO}) та енергія нижньої вакантної молекулярної орбіталі (E_{LUMO}). Прогнозування ймовірної біологічної активності здійснено у веб-сервісі SuperPred. Кореляційний та регресійний аналіз проводився у Microsoft Excel.

Розрахунок енергетичних характеристик показав, що всі досліджені сполуки мають електрофільні властивості, оскільки значення енергії нижньої незайнятої молекулярної орбіталі становить від -1,080 до -1,049 eV. Різниця енергій вищої зайнятої та нижньої вакантної молекулярних орбіталей, яка для всіх молекул більше ніж 1 eV, вказує на їх високу реакційну активність та здатність виступати жорстким реагентом згідно теорії ТМКО Пірсона. Розрахунок зарядів на атомах за методом Хюккеля показав, що молекули мають як електронодонорні (спільний атом Нітрогену триазольного та азепінієвого циклу, що має високий позитивний заряд; атом Нітрогену аміногрупи; атом Йоду сполуки 6), так і електроакцепторні центри (атоми Нітрогену триазольного циклу, атоми Оксигену сполук 3 та 4, Флору сполуки 4). Це є важливим для електронних взаємодій з іншими речовинами, в тому числі з молекулами ферментів у якості лігандів.

За допомогою онлайн-ресурсу Super-Pred було виявлено понад 100 ферментів, з якими вірогідно утворення білок-лігандних комплексів. Найбільшу вірогідність зв'язування (B3) спрогнозовано для білків Endoplasmic reticulum-associated amyloid beta-peptide-binding protein, Cathepsin D, Glutathione S-transferase Pi, Transcription intermediary factor 1- α , Kruppel-like factor 5, Muscarinic acetylcholine receptor M5 та M4, Cyclooxygenase-1, Inhibitor of nuclear factor kappa B kinase alpha subunit та Nuclear factor NF-kappa-B p105 subunit.

За результатами кореляційного та регресійного аналізу в координатах «ймовірність зв'язування з білком – квантово-хімічні параметри» встановлено високу кореляцію лише для залежностей:

- ймовірність зв'язування з Cathepsin D від енергії вищої зайнятої молекулярної орбіталі ($B3 = -32,5835 E_{\text{HOMO}} - 195,93$; $r = 0,971$);
- ймовірності зв'язування з Glutathione S-transferase Pi від заряду на атомі Нітрогену триазольного циклу ($B3 = 106557,7 q(N) + 37152,97$; $r = 0,944$).

Таким чином, вторинні аміни з триазолоазепіновим фрагментом є перспективними для подальшого дослідження з метою створення нових фармакологічних засобів.

Список використаних джерел

1. Leśniewska A, Przybylski P. Seven-membered N-heterocycles as approved drugs and promising leads in medicinal chemistry as well as the metal-free domino access to their scaffolds. *European Journal of Medicinal Chemistry*. 2024. P. 116556. URL: <https://doi.org/10.1016/j.ejmech.2024.116556>

Карпенко Є. Д., Карпенко Ю. О.

ЛІСОВІ ТЕРИТОРІЇ НОВГОРОД-СІВЕРСЬКОГО НАДЛІСНИЦТВА ЯК ОСЕРЕДКИ ОХОРОНИ РЕГІОНАЛЬНОГО БІОРІЗНОМАНІТТЯ

Європейська модель використання, відтворення та охорони лісів та їх статус визначається в рамках діяльності міждержавної робочої групи експертів, які пропонують застосування науково обґрунтованих критеріїв та індикаторів збереження і невиснажливого управління помірними і бореальними лісами за індикаторами екосистемного, видового і генетичного різноманіття [1]. Так, індикатори різноманіття екосистем рекомендується оцінювати за такими показниками як: площі різних типів лісу від загальної лісової площі; з врахуванням вікових класів або сукцесійних стадій; на територіях різного охоронного статусу; на територіях, що охороняються, з врахуванням вікових класів або сукцесійних стадій; ступенів фрагментації типів лісу, а також полідомінантності та різновіковості деревостану, наявності природного поновлення. Вартим уваги також є комплексний підхід до оцінки стану біорізноманіття лісів за параметрами відповідно до трьох основних аспектів досліджень лісів (структура, склад, функція) [1].

Також варто включати оцінки видового різноманіття лісових екосистем, а саме: чисельність «лісових» (залежних від лісу) видів, лісових видів різного охоронного статусу, з врахуванням ризиків для підтримання життєздатних їх популяцій та екоотопів і оселищ перебування.

На сучасному етапі багатофункціональне призначення лісових територій поліської частини України потребує розроблення різних механізмів лісокористування, які б включав систему організації лісогосподарської діяльності за комплексом напрямів, забезпечуючи одночасно як прибутковість використання лісових благ, так і розширене відтворення лісових ресурсів та їх виключну роль у стабілізації сучасних екологічних процесів і зміни клімату, а також збереження біорізноманіття [2].