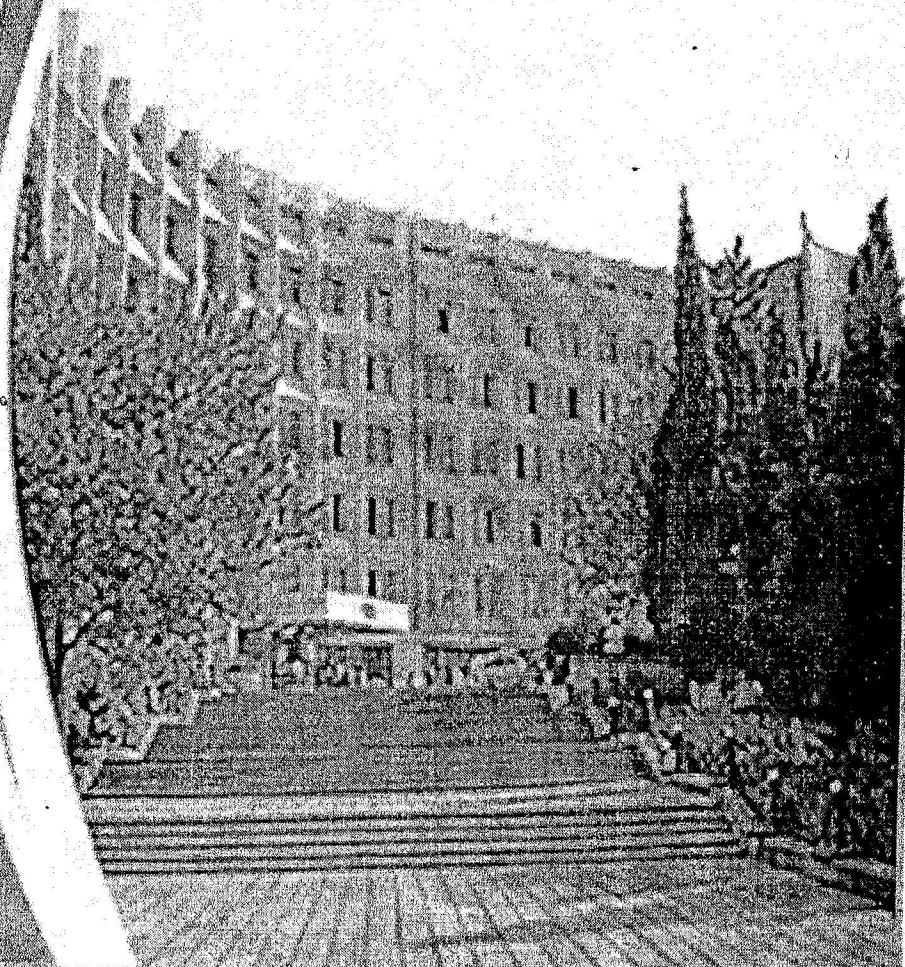


*Материалы  
VIII Международной  
научно-технической  
конференции*

**АКТУАЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ  
БИОЛОГИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ И ХИМИИ**

**БФФХ-2012**



Міністерство освіти і науки, молоді та спорту України  
Севастопольський національний технічний університет (СевНТУ)

**АКТУАЛЬНІ ПИТАННЯ  
БІОЛОГІЧНОЇ ФІЗИКИ ТА ХІМІЇ**

**БФФХ – 2012**

Матеріали VIII Міжнародної  
науково-технічної конференції  
м. Севастополь, 23 – 27 квітня 2012 р.

**АКТУАЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ БИОЛОГИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ И ХИМИИ  
БФФХ – 2012**

Материалы VIII Международной научно-технической конференции  
г. Севастополь, 23 – 27 апреля 2012 г.

**MODERN TRENDS IN BIOLOGICAL PHYSICS AND CHEMISTRY  
BPPC – 2012**

Materials of VIII International Science-Technical Conference  
Sevastopol, 23 – 27 of April, 2012

---

Севастополь 2012

---

Булыгин Е.А., Мухина Ю.В. Неэмпирический расчет энергии интеркаляционного комплекса флавинононуклеотида с динуклеотидами ДНК ( <i>Севастопольский национальный технический университет, г. Севастополь, Украина</i> ).....	142
Нечитайло В.А., Выхристюк Я.Г., Рыбакова К.А. Самоассоциация метилксантиновых производных и их гетероассоциация с профлавином и бромистым этидием в водном растворе ( <i>Севастопольский национальный технический университет, г. Севастополь, Украина</i> ).....	143
Шандрыгина О.В., Новикова О.С., Рыбакова К.А. Энергетический анализ гетероассоциации норфлоксацина с никотинамидом, кофеином и антибиотиками новатроном и актиномицином D ( <i>Севастопольский национальный технический университет, г. Севастополь, Украина</i> ).....	145
Костюков В.В., Евстигнеев М.П. Энергетика комплексообразования лигандов с РНК ( <i>Севастопольский национальный технический университет, г. Севастополь, Украина</i> ).....	146
Бучельников А.С., Евстигнеев В.П. Уточненные аналитические выражения для параметров равновесия в растворе ароматического соединения с учетом профиля константы самоассоциации ( <i>Севастопольский национальный технический университет, г. Севастополь, Украина</i> ).....	147

### БИООРГАНИЧЕСКАЯ, БИОФИЗИЧЕСКАЯ И МЕДИЦИНСКАЯ ХИМИЯ

Жуков В.И., Перепадя С.В., Зайцева О.В., Книгавко В.Г., Антюфеева О.И., Мірошниченко Н.Н. Оценка витаминного статуса больных колоректальным раком и его прогностическое значение ( <i>Харьковский национальный медицинский университет, г. Харьков, Украина</i> ).....	149
Зайцева О.В., Жуков В.И., Перепадя С.В., Винник Ю.О., Моисеенко А.С., Книгавко В.Г., Мещерякова О.П. Вивчення обміну іонів металів у хворих на колоректальний рак ( <i>Харьковский национальный медицинский университет, г. Харьков, Украина</i> ).....	151
Резуценко Ю.К. Обґрунтування використання біохімілюмінесцентного методу для виявлення сенсibiliзуючої та алергійної дії ксенобіотиків ( <i>Харьковский национальный медицинский университет, г. Харьков, Украина</i> ).....	153
Марков В.И., Фарат О.К. Синтез аналогов тропановых алкалоидов по реакции Манниха ( <i>ГВУЗ «Украинский государственный химико-технологический университет», г. Днепропетровск, Украина</i> ).....	155
Веклич Т.А., Шкрабак А.А., Костерин С.А. Каликс[4]арен С-90 как ингибитор $Ca^{2+}$ , $Mg^{2+}$ -атразы плазматической мембраны гладкомышечных клеток ( <i>Институт биохимии им. А.В. Палладина НАН Украины, г. Киев, Украина</i> ).....	156
Чекман І.С., Звягінцева Т.В., Сирова Г.О., Небесна Т.Ю., Шаповал О.В. Квантово-хімічні дослідження молекули 2,4 – дихлорбензойної кислоти ( <i>Харківський національний медичний університет, м. Харків, Україна</i> ).....	157
Мазилев А.В., Стадник И.А., Ткаченко В.И., Кутний Д.В., Гордненко Ю.А. Радиационные риски персонала ННЦ ХФТИ ( <i>Национальный научный центр «Харьковский физико-технический институт», г. Харьков, Украина</i> ).....	159
Путинцева О.В., Артюхов В.Г., Синева Е.В. Влияние восстановленного глутатиона на электрофоретические характеристики оксигемоглобина человека (ФГБОУ ВПО «Воронежский государственный университет», г. Воронеж, Россия).....	161
Суходуб Л.Б., Казмірчук В.В., Радченко О.О., Поволокіна І.В. Протимікробна характеристика композитних біоматеріалів (ДУ «Інститут мікробіології та імунології ім. І. Мечникова» АМН України, м. Харків, Україна).....	163
Рогожин Е.А., Егоров Ц.А., Гришину Е.В. Структурно-функциональная характеристика защитных белков и пептидов зерновок ежовника обыкновенного ( <i>Echinocloa crus-galli L.</i> ) ( <i>Институт биоорганической химии им. акад. М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова РАН, г. Москва, Россия</i> ).....	164
Нечипорук В.М., Корда М.М. Вплив дексаметазону на метаболізм метіоніну ( <i>Вінницький національний медичний університет ім. М.І. Пирогова, м. Вінниця; Тернопільський державний медичний університет ім. І.Я. Горбачевського, м. Тернопіль, Україна</i> ).....	165
Жирнов В.В., Яковенко И.И., Грубская Л.В., Семенов С.В. Влияние наложенного поля $\beta$ -излучения малой мощности на дзета потенциал эритроцитов человека при действии блокаторов калиевых каналов ( <i>Институт биоорганической химии и нефтехимии НАН Украины, г. Киев, Украина</i> ).....	166
Данилович А.В., Данилович Ю.В., Коломнец О.В. Влияние каликс[4]аренов – ингибиторов $Na^+$ , $K^+$ -АТР-азы на поляризацию плазматической и митохондриальной мембран гладкомышечных клеток матки ( <i>Институт биохимии им. А.В. Палладина НАН Украины, м. Киев, Украина</i> ).....	168
Gudkova O.A., Latyshko N.V., Portova P.A. The Rat Thymocytes Response to Oxidative Stress Conditions ( <i>Palladin Institute of Biochemistry NASU, Kyiv, Ukraine</i> ).....	169
Демченко А.М. Поиск новых лекарственных препаратов среди азотсодержащих гетероциклов ( <i>Институт фармакологии и токсикологии НАМН Украины, г. Киев, Украина</i> ).....	170
Кулибаба Е.В., Кара О.П. Исследования АЛТ-активности в эмбриональных и сформированных мышечных тканях после аллотрансплантации ( <i>Одесский национальный университет им. И.И. Мечникова, г. Одесса, Украина</i> ).....	171
Кобыльнич С.Н., Тыдюк Г.А. Уровень свободного тиаминна при трансплантации мышечной ткани однопомётных крыс ( <i>Одесский национальный университет им. И.И. Мечникова, г. Одесса, Украина</i> ).....	171



поскольку каліксарен С-90 содержит 4 таких фрагмента, приводит к ингибированию активности  $\text{Ca}^{2+}, \text{Mg}^{2+}$ -АТРазы на  $12,5 \pm 1,7\%$  относительно контрольного значения ( $M \pm m$ ;  $n=5$ ).

Следовательно, ингибирующее действие каліксарена С-90 на активность  $\text{Ca}^{2+}, \text{Mg}^{2+}$ -АТРазы прежде всего связано именно с кооперативным влиянием четырех пространственно ориентированных на каліксареновой платформе фенилсульфонилтрифторо-метилацетимидоамидных групп, а не с действием тетрафенольного макроцикла как такового, или с действием отдельного фенилсульфонилтрифторометилацетимидоамидного остатка.

Предполагается, что экспериментальные данные, полученные с использованием каліксарена С-90 – ингибитора  $\text{Ca}^{2+}, \text{Mg}^{2+}$ -АТРазы, могут иметь важное значение для выяснения мембранных механизмов катионного обмена в гладкомышечных клетках, в частности, с целью изучения роли плазматической мембраны в обеспечении электромеханического сопряжения в них, а также в регуляции ионного гомеостаза в миоцитах.

Авторы выражают признательность член-кор. НАН Украины В.И. Кальченко и его сотрудникам (Институт органической химии НАН Украины) за синтезированные и охарактеризованные (методами ИК- и ЯМР-спектроскопии) и любезно предоставленные нам каліксарены.

#### Бібліографічний список

1. Woodcock N.A. Effect of an oxytocin receptor antagonist and rho kinase inhibitor on the  $[\text{Ca}^{2+}]_i$  sensitivity of human myometrium / N.A. Woodcock, C.W. Taylor, S. Thornton // *Am. J. Obstet. Gynecol.* — 2004. — V. 190, № 1. — P. 222–228.
2. Hertelendy F. Regulation of myometrial smooth muscle functions / F. Hertelendy, T. Zakar // *Curr. Pharm. Des.* 2004. — V. 10, № 20. — P. 2499–2517.
3. Floyd R. Calcium transporters and signalling in smooth muscles / R.Floyd, S. Wray // *Cell Calcium.* — 2007. — V. 42, № 4–5. — P. 467–476.
4. Carrera F. Ca-ATPase of Human Myometrium Plasma Membranes / F. Carrera // *Physiol. Res.* — 2000. — V. 49. — P. 331–338.
5. Костерин С.А. Транспорт и внутриклеточный гомеостаз  $\text{Ca}^{2+}$  в миометрии / С.А. Костерин, Ф.В. Бурдыга // *Успехи совр. биол.* — 1993. — Т. 113, № 4. — С. 485–506
6. Asfari Z. Calixarenes / Eds: Z. Asfari, V. Boehmer, J. Harowfield, J. Vicens // Eds., Kluwer Academic Publishers, Dordrecht. — 2001. — P. 512.
7. Кальченко В.І. Каліксарени. Перспективи медико-біологічного застосування / В.І. Кальченко, Р.В. Родік, В.І. Бойко // *Журнал органічної та фармацевтичної хімії.* — 2005. — Т. 3, вип. 4. — С. 13–29.
8. Perret F. Biochemistry of the para-sulfonato-calix[n]arenes / F. Perret, A.N. Lazar, A.W. Coleman // *Chem. Commun.* — 2006. — С. 2425–2438.
9. Кондратюк Т.П. Выделение и характеристика фракции плазматических мембран миометрия свиньи / Т.П. Кондратюк [и др.] // *Укр. биохим. журн.* — 1986. — Т. 58, № 4. — С. 50–56.

УДК 615.276

І.С. Чекман, член-кор. НАН, НАМН, д-р мед. наук, професор, завідувач кафедри

Т.В. Звягінцева, д-р мед. наук, професор, завідувач кафедри

Г.О. Сирова, канд. фарм. наук, доцент, завідувач кафедри

Т.Ю. Небесна, канд. фарм. наук, асистент

О.В. Шаповал, канд. мед. наук, ст.викладач

*Харківський національний медичний університет*

*пр. Леніна, 4, м. Харків, Україна*

*E-mail: Annasirova@rambler.ru*

#### КВАНТОВО-ХІМІЧНІ ДОСЛІДЖЕННЯ МОЛЕКУЛИ 2,4 – ДИХЛОРБЕНЗОЙНОЇ КИСЛОТИ

Метод Quantitative Structure Activity Relationship (QSAR) використовує квантово-хімічні дескриптори – структурні параметри молекули, які одержують на основі квантово-хімічних розрахунків [1-4].

За допомогою QSAR нами проведено оптимізацію геометрії молекули 2,4 – дихлорбензойної кислоти послідовно методом молекулярної механіки MM+ та напівемпіричним методом PM<sub>3</sub>. Для всіх досліджень використаний алгоритм Рібера-Полака [5 – 8]. Досліджені показники: відстані між атомами (Å); значення кутів між зв'язками (°); розподіл електронної щільності тільки зовнішніх валентних електронів; розподіл електростатичного потенціалу в молекулі; загальна енергія напруги молекули (ккал/моль); енергія зв'язування (ккал/моль); електронна енергія (ккал/моль); енергія між'ядерної взаємодії (ккал/моль); теплота утворення (ккал/моль); заряди на атомах (ат. од.); значення дипольного моменту молекули (Д); локалізація та енергія вищої зайнятої (ВЗМО) і нижчої вакантної (НВМО) молекулярних орбіталей (eV); значення абсолютної жорсткості (η) (eV) [9].

У результаті квантово-хімічних досліджень нами встановлено основні структурні, енергетичні та електронні характеристики молекули 2,4 – дихлорбензойної кислоти. Найбільша електронна густина оточує електронегативні атоми оксигену та хлору, в меншій ступені – атоми карбону, зовсім немає її навколо атомів



гідрогену (див. рисунок 1). Вказані атомні угруповання будуть визначати реакційну активність молекули 2,4-дихлорбензойної кислоти при взаємодії з різноманітними лігандами.

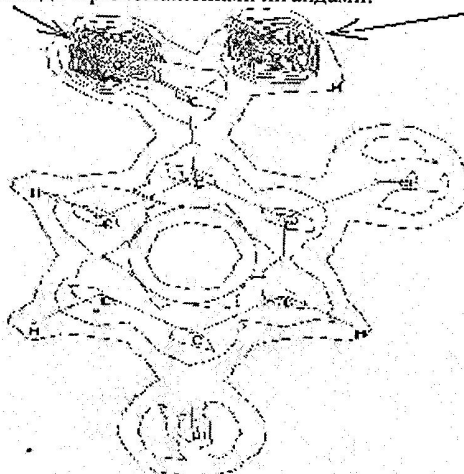


Рисунок 1 – Розподіл електронної густини зовнішніх валентних електронів в молекулі 2,4-дихлорбензойної кислоти – стрілками вказані атоми кисню, на яких електронна густина найбільша

Важливими параметрами, що характеризують реакційну властивість молекули, є значення і локалізація ВЗМО і НВМО. Згідно з підходом Н. Fukui, граничні орбіталі молекули, головним чином, визначають характер її хімічних перетворень. Інформативною характеристикою при дослідженні квантово-хімічних властивостей лікарських засобів є розподіл в молекулах електростатичного потенціалу. Розподіл електростатичного потенціалу в молекулі 2,4-дихлорбензойної кислоти представлений на рисунку 2.

Атом кисню, вказаний стрілкою, має негативний електростатичний потенціал і здатний до протонування. Отже саме цей атом приймає участь у формуванні водневих зв'язків при взаємодії 2,4-дихлорбензойної кислоти з активними центрами рецепторів.

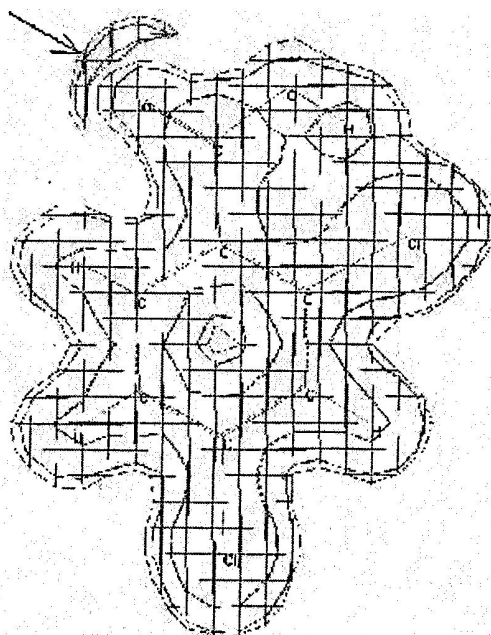


Рисунок 2 – Розподіл електростатичного потенціалу в молекулі 2,4-дихлорбензойної кислоти – стрілкою вказано атом кисню з негативним електростатичним потенціалом

За хімічною структурою 2,4-дихлорбензойна кислота є м'яким реагентом, тому найбільш активно може проявлятися її взаємодія з речовинами лужного характеру – лужними амінокислотами, ненасиченими і ароматичними сполуками. Центром протонування та утворення водневих зв'язків в молекулі 2,4-дихлорбензойної кислоти є атом кисню карбоксильної групи.

Висновки:

1. За допомогою квантово-хімічних досліджень встановлені основні геометричні, енергетичні та електронні характеристики молекули 2,4 – дихлорбензойної кислоти: основним реакційним центром молекули, центром протонування є атом оксигену карбоксильної групи.

2. За хімічною структурою молекула 2,4 – дихлорбензойної кислоти відноситься до м'яких реагентів; тому найбільш активно може проявлятися її взаємодія з речовинами лужного характеру.

**Бібліографічний список**

1. Molecular modeling and QSAR analysis of the estrogenic and terpenoids isolated from *Fedula* plants / V.F. Basulev, A.I. Saidkhodzhaev, S.S. Narzullaev [et al.] // SAR QSAR Environ Res. — 2007. — V. 18, № 7–8. — P. 663–673.
2. Pezzella A. Short-lived quinonoid species from 5,6-dihydroxyindole dimer en route to eumelanin polymers: integrated chemical, pulse radiolytic, and quantum mechanical investigation / A. Pezzella, L. Panzella, O. Crescenzi // J. Amer. Chem. Soc. — 2006. — V. 128. — P. 15490–15498.
3. Saan H.M. QM/MM methods for biomolecular system / H.M. Saan, W. Thiel // Andrew Chem. INT. ed. Engl. — 2009. — V. 48, № 7. — P. 1198–1229.
4. Shoichet B.K. The role of macromolecular crystallography and structure for drug discovery / B.K. Shoichet, D.E. Bussiere // Current Opinion in Drug Discovery and Development. — 2000. — № 3. — P. 408–422.
5. Вивчення молекулярної структури та квантово-хімічних властивостей ацетилцистеїну / Т.Ю. Небесна, М.І. Загородний, А.С. Ягупова [та ін.] // Укр. наук.-мед. молодіжний журн. — 2007. — № 1–2. — С. 19–23.
6. Небесна Т.Ю. Дослідження квантово-хімічних властивостей бета-адреноблокаторів – ателололу, метопрололу, пропранололу / Т.Ю. Небесна, І.С. Чекман // Науковий вісник національного медичного університету ім. О.О. Богомольця. — 2006. — № 4. — С. 79–86.
7. Солов'єв М.Е. Компьютерная химия / М.Е. Солов'єв, М.М. Солов'єв. — М.: Солон-пресс, 2005. — С. 175–185.
8. Флениген М. Полуэмпирические методы расчета электронной структуры / М. Флениген, Э. Коморницки, Дж. Мак-Ивер; под ред. Дж. Сигала. — М.: Мир, 1980. — Т. 2. — С. 5–64.
9. Апостолова Е.С. Квантово-химическое описание реакций / Е.С. Апостолова, А.И. Михайлюк, В.Г. Цирельсон. — М.: Издательский центр МОРФ, 1999. — 45 с.

УДК 621.384.64: 613.06.027

А.В. Мазиллов, ст. науч. сотр., канд. физ.-мат. наук,

И.А. Стадник, инженер-исследователь I кат.

В.Н. Ткаченко, канд. биол. наук,

Д.В. Кутний, канд. физ.-мат. наук,

Ю.А. Гордиенко, инженер-исследователь I кат.

Национальный научный центр «Харьковский физико-технический институт»

ул. Академическая, 1, г. Харьков, Украина, 61108

E-mail: mazilov@kipt.kharkov.ua

**РАДИАЦИОННЫЕ РИСКИ ПЕРСОНАЛА ННЦ ХФТИ**

В 101-й публикации Международного комитета по радиологической защите (МКРЗ), посвященной оптимизации радиационной защиты, вводится понятие «дозовой матрицы», которая должна учитывать динамику полученных работником доз облучения с момента постановки на индивидуальный дозиметрический контроль (ИДК) и служить основой для оценки величины индивидуального радиационного риска. Индивидуальный радиационный риск оценивается по модели UNSCEAR-94, разработанной Научным комитетом по действию атомной радиации при ООН (НКДАР ООН) по данным исследований, проведенных среди облученного в результате атомных бомбардировок в 1945 году населения японских городов [1,2]. В данной модели используются следующие термины:

- *EAR* – избыточный абсолютный риск (*Excess Absolute Risk*) - вероятность заболевания радиационно-обусловленным раком;

- *ERR* – избыточный относительный риск (*Excess Relative Risk*) – обусловленный облучением прирост (в процентах либо в долях) вероятности заболевания раком относительно фоновой вероятности заболевания раком данной локализации в данном возрасте лица данного пола;

- *AR* – атрибутивный риск (*Attributable Risk*) – доля фактора облучения (избыточного абсолютного риска) в суммарной вероятности заболеть раком у облученного лица (которая складывается из фоновой вероятности ракового заболевания и *EAR*).

Согласно модели UNSCEAR-94, если  $m_0$  – фоновое количество раковых заболеваний, а  $m$  – наблюдаемое количество заболеваний в группе облученных людей того же пола и той же возрастной категории, то наблюдаемое количество заболеваний среди облученных людей можно выразить через фоновое в аддитивной форме:

$$m = m_0 + EAR, \tag{1}$$