

відбувається за змішаним π -, σ -механізмом із превалюванням π -складової в перерозподілі електронної густини в кластері алмазу для взаємодії з CO_2 , що призводить до перебудови електронного спектра в поверхневому шарі алмазу і переходу останнього у фізично інший стан (напівпровідник, провідник). Ці висновки добре узгоджуються з експериментальними результатами.

Під час вивчення міжфазової межі алмаз-борвмісний розплав як характерні для розплаву обрано молекули BO_2^- , BO_3^{3-} , що є ізоелектронними з молекулами CO_2 і CO_3^{2-} . Аналіз взаємодій кластера BO_2^- і BO_3^{3-} , свідчить про те, що під час контакту алмазу з борвмісними розплавами відбувається перенесення заряду з молекул розплаву на атоми алмазу та перерозподіл електронної густини за σ -механізмом, що, відповідно до запропонованої схеми, свідчить про неможливість виникнення поверхневої провідності алмазу в борвмісних розплавах.

Добра кореляція отриманих результатів з експериментом, на фоні широкого практичного застосування синтетичних алмазів, стимулювали проведення розрахунків взаємодії кластера синтетичного алмазу на основі нітриду бору з молекулами CO_2 і BO_2^- .

Відповідно до схеми для взаємодії $(\text{BN})_4 \dots \text{CO}_2$ і $(\text{BN})_4 \dots \text{BO}_2^-$ спостерігається відтік електронної густини вглиб борозону (кластера нітриду бору), проте сумарне перенесення негативного заряду на атоми кластера залишає дискусійним питання про можливість металізації боразона в оксидних розплавах, які містять як основні молекули CO_2 і BO_2^- .

Таким чином, виконаний комплекс квантовохімічних розрахунків дав змогу пояснити на електронному рівні виникнення поверхневої провідності алмазу, зануреного в юнний розплав, і на основі розробленої схеми прогнозувати можливість таких ефектів при контакті діелектрика з юнним розплавом, без попередньої металізації діелектриком.

Список використаних джерел

1. Schlegel H.B. Combining Synchronous Transition and Quasi-Newton Methods to Find Transition States. Israel Journal of Chemistry. 1993. Vol. 3. P.449–454
2. Press W. H. Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing, Cambridge University Press. 1986. Vol. 13. P.449–456.

ІСТОРІЯ ХІМІЇ ЯК АСПЕКТ ВИХОВАННЯ ГУМАНІСТИЧНОГО СВІТОГЛЯДУ

В. В. Соловйов¹, А. В. Деркач¹, Т. Ю. Кузнецова¹, Н. В. Соловйова²

¹ Полтавський національний педагогічний університет імені В. Г. Короленка

² Полтавський державний медичний університет

Одним із найважливіших завдань закладів вищої освіти є виховання гуманної, творчої особистості, здатної до самовдосконалення як в інтелектуальному, так і в моральному плані. Хімія, як одна з основних природничих наук, покликана сформувати культуру фізико-хімічного мислення, дати студентам цілісне уявлення про методологію пізнання оточуючого світу та визначити ефективні і разом із тим етично прийнятні шляхи взаємодії людини з навколишнім середовищем. Важливу роль в процесі виховання духовно розвинутої, творчої й відповідальної особистості повинна відіграти історія хімії - історія розвитку людської думки, пошуку шляхів до істини, до чого має приєднатися майбутня інтелектуальна еліта.

Ознайомлення студентів із соціальними та культурними особливостями умов життя і діяльності дослідників минулого яскраво демонструють загальнокультурне значення їх роботи, універсальність методів пізнання, які протягом століть виробили представники природничих наук, й актуальність цих методів у наш час. Історичний аспект допомагає показати зв'язок поколінь, наступництво наукових шкіл. Ще одна мета введення історичного аспекту - показати студентам, що в історії людської думки практично немає непотрібних зусиль, невиправданих гіпотез, тобто піднести значення розумової праці і творчого пошуку як найвищого прояву людського духу. Крім того, історія хімії, особливо за останнє сторіччя, поставила перед вченими складну морально- етичну проблему відповідальності за можливі наслідки їх наукових робіт. Отже, висока духовність дослідника стає необхідною умовою подальшого розвитку та прогресу людства в цілому.

Винятково ефективним є ознайомлення студентів із діяльністю та історією життя вчених України та Полтавщини. Вагомий доробок цих вчених поглиблює патріотичні почуття студентів, їх гордість за представників національної науки й пробуджує бажання працювати для розвитку і процвітання вітчизняної науки.

Історичний аспект, вихід у процесі викладання курсу хімії на філософські узагальнення збагачують курс і становлять реальні способи гуманізації освіти. Введення історичного контенту дає змогу значно підвищити ефективність навчально-виховного процесу.

НОВИЙ ПОГЛЯД НА РОЛЬ NO В РЕГУЛЯЦІ ВІЛЬНОРАДИКАЛЬНИХ ПРОЦЕСІВ

**В. В. Соловйов¹, Т. Ю. Кузнецова¹, А. О. Омельчук², Е. А. Стезярянський²,
Н. В. Соловйова³, О. Е. Закоłodна³**

¹ Полтавський національний педагогічний університет імені В. Г. Короленка

² Інститут загальної та неорганічної хімії ім. В. І. Вернадського НАН України

³ Полтавський державний медичний університет

Оксид азоту (NO) вже давно відомий як важлива біологічно активна молекула, що бере участь у регуляції різноманітних фізіологічних процесів, таких як вазодилатація, нейротрансмісія та імунна відповідь. Проте, роль NO у регуляції вільнорадикальних процесів досі залишається предметом активних досліджень та часто є суперечливою. Традиційно вважалося, що NO виступає як прооксидант, сприяючи утворенню вільних радикалів та посилюючи окислювальний стрес. Проте, накопичується все більше доказів того, що NO є потужним антиоксидантом, який захищає клітини від пошкодження вільними радикалами. Розуміння дуалістичної природи NO у регуляції вільнорадикальних процесів є критично важливим для розробки нових терапевтичних стратегій, спрямованих на лікування захворювань, пов'язаних з окислювальним стресом, таких як серцево-судинні захворювання, нейродегенеративні захворювання та рак.

У попередніх роботах [1, 2, 3] була розглянута можливість використання електрохімічних досліджень разом із квантово-хімічними розрахунками для характеристики властивостей антиоксидантів при їх взаємодії із вільними радикалами.

Тому, доцільно використати запропонований підхід для вивчення ролі оксиду азоту (II) в процесах вільнорадикального окислення.

Взаємодія L-аргініну із киснем при наявності в достатній концентрації NO-синтаз