

4. Переход Е.А., Чаленко Г.И., Герасимова Н.Г. и др.//Доклады РАН. 1997. Т. 335, №1.С.120-122
5. Jabbalgil Г., Rappuoli R., Davis S.S., Шит L.// Vaccine, 1998. V.16. № 20. P.2039– 2046.
6. Феофилова Е.П. Хитон, хитин, хитан, хитозан.// Химия и жизнь.– 1992.- №11 – С.86-88.
7. Хитин и хитозан: получение, свойства и применение/Под ред. К.Г.Скрябина, Г.А. Вихоревой, В.П.Варламова.– М.: Наука, 2002.– 368 с.

МОДЕЛЮВАННЯ ВПЛИВУ РОЗЧИННИКА НА СПЕКТРАЛЬНІ ВЛАСТИВОСТІ ГЕТЕРОАРОМАТИЧНИХ МОЛЕКУЛ

Сахно Т.В., Пустовіт С.В. (Полтава)

Використання напівемпіричних і неемпіричних (ab initio) методів молекулярного моделювання дозволяє установити загальні закономірності впливу природи розчинника на спектрально люмінесцентні характеристики молекул, що дає можливість розширити галузь їхнього застосування.

Був проведений розрахунок плоских гетероароматичних молекул нафтостирилу, акридону і фенантридону які мають подібну структуру і хромофорні фрагменти.

Розрахунки ab initio методом CIS/CEP-31G проводили з використанням програми Gaussian 03. Напівемпіричні квантово-хімічні розрахунки досліджуваних сполук здійснювали за допомогою методу РМЗ (HyperChem 7.5 Demo). Як ab initio, так і напівемпіричні розрахунки були виконані при повній оптимізації геометрії (метод РМЗ, алгоритм Полака-Рібейра (Polak-Ribiere)).

Виконано детальний аналіз УФ-спектрів досліджуваних сполук в розчинниках з різною полярністю (19 найменувань). Встановлена залежність положення максимумів смуг поглинання як функції величини Кірквуда-Онзагера.

Серед дослідженого ряду молекул у всіх представників спостерігається флуоресценція у полярних і неполярних розчинниках. Але в залежності від полярності розчинника спостерігається інверсія рівнів різної орбітальної природи що суттєво впливає на спектральні властивості молекул.

Виконане квантово хімічне моделювання впливу розчинника на відносне положення рівнів енергії нижчих електронно-збуджених станів молекул нафтостирилу, фенантридону й акридону, положення яких змінюється за рахунок збільшення енергії, головним чином, π^* -рівнів. Це покладено в основу інтерпретації залежності спектральних властивостей молекул з хромофорами $>C=O$ і $-NH-$ від полярності розчинника.

СТУДЕНТСЬКИЙ ПРИРОДООХОРОННИЙ РУХ У М. ПОЛТАВА

Кращенко Ю.П., Рома О.В. (Полтава)

Екологічні проблеми, які наразі стосуються кожного жителя територіальної громади, мають вирішуватися шляхом інтеграції зусиль органів державної, місцевої влади та громадськості від територіального до загальнонаціонального рівня. У цьому відношенні активну позицію має відігравати студентство