

Список літератури:

1. Закон України «Про загальнообов'язкове державне пенсійне страхування» від 09.07.2003 №1058-IV. URL: <http://www.rada.gov.ua/> (дата звернення 01.04.2019).
2. Закон України «Про заходи щодо законодавчого забезпечення реформування пенсійної системи» від 08.07.2011 №3668-VI. URL: <http://www.rada.gov.ua/> (дата звернення 01.04.2019).
3. Закон України «Про запобігання фінансової катастрофи та створення передумов для економічного зростання в Україні» від 27.03.2014 №1166-VII. URL: <http://www.rada.gov.ua/> (дата звернення 01.04.2019).
4. Шулюк Б. С. Бюджетування соціальної сфери: зарубіжний досвід та українські реалії / Економічний аналіз : зб. наук. праць каф. екон. аналізу Терноп. нац. екон. ун-ту. Тернопіль : Економічна думка. 2008. Вип. 2. С. 144-147.
5. Розвиток державного пенсійного страхування в умовах пенсійної реформи: монографія / О. П. Кириленко, Б. С. Малиняк, О. В. Петрушка та ін. Тернопіль: ТНЕУ. 2013. 350 с.

**ГЕОМЕТРИЧЕСКОЕ И ЭЛЕКТРОННОЕ СТРОЕНИЕ МОЛЕКУЛЫ
МЕЛАТОНИНА****Соловьев В.В.**

д.х.н., проф.

Прокопенко А.А.

студентка

Просветов С.Д.

студент

Полтавский национальный технический университет
имени Юрия Кондратюка E-mail: k23@pntu.edu.ua

Наличие многих уникальных свойств у гормона мелатонина (способность регулировать большинство физиологических и иммунно - нейроэндокринных функций организма, нейтрализовывать негативное действие свободных радикалов на организм и др.) обуславливает в настоящее время его применение для лечения различных заболеваний (депрессивного синдрома, бессоннице, болезни Альцгеймера и Паркинсона и др.). Особенный интерес представляет значительное количество публикаций как зарубежных, так и отечественных авторов, об избирательном угнетающем влиянии мелатонина (МЛТ) на размножение раковых клеток в лечении ранних стадий онкологических заболеваний. Так, например, полученные клинические данные по результатам экспериментов, которые проводились на мышах, указывают на положительный эффект МЛТ (70-80%), в отношении целого ряда раковых заболеваний [1,2].

Вместе с тем полученные положительные результаты применения гормона при лечении раковых и других заболеваний, полученные на основании только анализа статистических данных, не позволяют объяснить и понять природу биохимических процессов, приводящих к такому результату и носят чисто феноменологический характер. Поэтому представляется целесообразным применение современных высокоточных неэмпирических квантово-химических расчетов, как для установления электронного и геометрического строения молекулы МЛТ, так и для перспективы изучения механизма его взаимодействия с молекулами живых организмов, свободными радикалами и др.

В настоящее время нам не известны работы, в которых было бы установлено электронное и геометрическое строения молекулы МЛТ ($C_{13}H_{16}N_2O_2$). А в биохимических реакциях взаимодействие гормона, например, со свободными радикалами [4,3], приводится лишь запись его структурной формулы. Поэтому представляет интерес установить, прежде всего, геометрическое и электронное строение молекулы мелатонина, что даст возможность не только на клеточном, но и на электронном уровне, получить

как обоснование, положительного эффекта применения МЛТ, так и потенциальную значимость в управлении процессами применения этого гормона в качестве лекарственного средства.

Изучение геометрического и электронного строения молекулы МЛТ проводились путем квантово-химических неэмпирических расчётов с применением пакета программ GAMESS с использованием гаусовских базисных наборов: в валентно-расщеплённом базисе Хузинаги с использованием неограниченного Хартри-Фоковского метода ССП МОЛКАО. В процессе вычисления использовалась градиентная техника полной автоматической оптимизации геометрии объектов с одновременной сменой длины связей и углов до значения максимальной компоненты градиента 0,001.

На основании полученных расчетов геометрических параметров молекулы мелатонина (табл. 1), зарядов на атомах по Лёвдину (табл.2), межатомных расстояний (R) и порядков связей (B_{ij}) между атомами в молекуле мелатонина (табл.3) была построена пространственная модель молекулы мелатонина (рис. 1).

Таблица 1

Геометрические параметры молекулы мелатонина по данным расчета

Атом	X	Y	Z	Атом	X	Y	Z
C(1)	1,785	0,791	0,057	H(18)	4,440	2,364	1,649
C(2)	1,128	-0,438	0,119	H(19)	5,644	1,670	0,548
C(3)	3,133	0,809	-0,189	C(20)	-1,411	0,092	0,581
C(4)	1,868	-1,613	-0,060	C(21)	-2,394	0,072	-0,613
C(5)	3,856	-0,371	-0,389	H(22)	-1,873	0,343	-1,525
C(6)	3,232	-1,592	-0,319	H(23)	-2,803	-0,920	-0,731
O(7)	3,763	2,051	-0,306	H(24)	-1,057	1,109	0,734
N(8)	0,993	-2,672	0,064	H(25)	-1,963	-0,187	1,476
H(9)	4,904	-0,311	-0,616	N(26)	-3,524	0,976	-0,413
H(10)	3,783	-2,505	-0,471	H(27)	-3,379	1,957	-0,553
H(11)	1,269	1,725	0,188	C(28)	-4,750	0,537	-0,033
C(12)	-0,241	-0,823	0,358	O(29)	-4,991	-0,646	0,165
C(13)	-0,272	-2,175	0,319	C(30)	-5,798	1,622	0,107
H(14)	1,229	-3,638	-0,027	H(31)	-5,982	2,098	-0,853
H(15)	-1,098	-2,843	0,459	H(32)	-6,713	1,171	0,465
C(16)	4,814	2,367	0,628	H(33)	-5,471	2,384	0,811
H(17)	5,154	3,360	0,363				

*Все координаты атомов указаны относительно точки (0;0;0) – центра масс системы.

Заряды на атомах в молекуле мелатонина по Лёвдину*

Атом	q	Атом	q	Атом	q
C(1)	-0,138	C(12)	-0,083	H(23)	0,118
C(2)	-0,035	C(13)	-0,052	H(24)	0,095
C(3)	0,103	H(14)	0,201	H(25)	0,108
C(4)	0,037	H(15)	0,123	N(26)	-0,244
C(5)	-0,141	C(16)	-0,096	H(27)	0,187
C(6)	-0,129	H(17)	0,104	C(28)	0,243
O(7)	-0,285	H(18)	0,087	O(29)	-0,377
N(8)	-0,155	H(19)	0,086	C(30)	-0,317
H(9)	0,113	C(20)	-0,170	H(31)	0,117
H(10)	0,114	C(21)	-0,076	H(32)	0,129
H(11)	0,117	H(22)	0,098	H(33)	0,115

*Заряды в таблице и по в тексте приведены в атомных единицах.

Таблица 3

Величины расстояний (R) и порядков связей (B_{ij}) между атомами в молекуле мелатонина

АТОМЫ	R, нм	B_{ij}	АТОМЫ	R, нм	B_{ij}
C(1)-C(2)	0,140	1,303	C(16)-H(19)	0,108	0,967
C(1)-H(11)	0,107	0,949	C(20)-H(25)	0,108	0,972
C(12)-C(2)	0,144	1,247	C(21)-N(26)	0,144	0,842
C(3)-O(7)	0,136	0,800	C(28)-O(29)	0,120	1,785
C(6)-C(5)	0,137	1,516	C(30)-H(32)	0,107	0,970
C(16)-O(7)	0,139	0,849	C(1)-C(3)	0,137	1,545
H(14)-N(8)	0,099	0,895	C(4)-C(2)	0,140	1,367
C(3)-C(4)	0,276	0,063	C(2)-C(5)	0,277	0,068
C(4)-C(6)	0,139	1,348	C(3)-C(5)	0,140	1,335
C(5)-H(9)	0,109	0,957	C(4)-N(8)	0,137	0,954
C(12)-N(8)	0,224	0,059	C(6)-H(10)	0,107	0,954
C(12)-C(13)	0,135	1,693	C(13)-N(8)	0,137	1,029
C(16)-H(17)	0,108	0,978	C(20)-C(12)	0,150	0,948
C(20)-C(21)	0,153	0,955	C(16)-H(18)	0,109	0,966
C(21)-H(22)	0,108	0,977	C(20)-H(24)	0,108	0,980
H(27)-N(26)	0,099	0,896	C(21)-H(23)	0,108	0,962
C(28)-C(30)	0,151	0,951	C(28)-N(26)	0,135	1,058
C(30)-H(33)	0,108	0,963	C(30)-H(31)	0,108	0,962

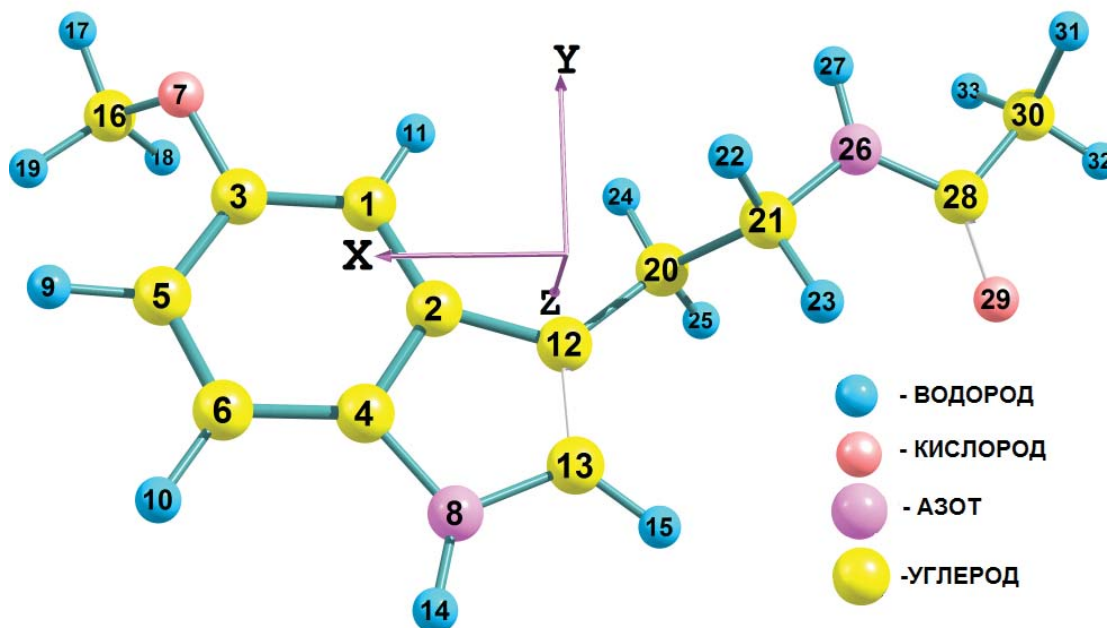


Рисунок 1. Равновесное пространственное строение молекулы мелатонина

Таким образом, впервые проведены расчеты электронного и геометрического строения молекулы МЛТ, позволяющее на электронном уровне проводить оценку взаимодействия молекулы МЛТ с различными объектами для понимания статистических закономерностей, полученных на основании экспериментальных результатов. Следует отметить, что наши предварительные расчеты молекулы МЛТ со свободными радикалами позволили получить интересную интерпретацию полученных ранее результатов.

Список литературы:

1. Кветная Т.В., Князькин И.В. Мелатонин: Роль и значение в возрастной патологии / РАМН; Под ред. проф. В.Х. Хавинсона.- СПб.: ВМЕДА, 2003.- 94с.
2. Анисимов В. Н. Мелатонин роль в организме, применение в клинике / В. Н Анисимов –С-Пб.: Издат-во «Система», 2007. – 40 с.
3. Барабой В.А. Антиокислительная и биологическая активность мелатонина / В.А. Барабой. // Укр. біохім. журнал. 2000. Т 72, №3. – С. 5-11.

4. Беспятых А. Ю. Мелатонин как антиоксидант: основные функции и свойства / А. Ю. Беспятых, О. В. Бурлакова, В. А. Голиченков // Успехи современной биологии. – 2010. – Т. 130, № 5. – С. 487–496 .

ЗАЛЕЖНІСТЬ ФІЗИКО-ТЕХНОЛОГІЧНИХ ХАРАКТЕРИСТИК ЗЕРНА КУКУРУДЗИ ВІД ВОЛОГОСТІ

Станкевич Г.М.

д-р.техн.наук, професор

Борта А.В.

канд. техн. наук, доцент

Страхова Т.В.

канд. техн. наук, доцент

Желобкова М.В.

аспірант

Одеська національна академія харчових технологій

Виробництво зерна – одне з найважливіших завдань агропромислового комплексу України. В його розв'язанні значне місце належить кукурудзі – культурі необмежених можливостей за використанням в різних галузях економіки.

Сьогоднішній аграрій завдяки розвиненій генетиці і технології вирощування досягає успіху в отриманні високих показників врожайності. Рамки осучасненого використання кукурудзи важко переоцінити. Потреба в кукурудзі і межі застосування не обмежуються тільки споживанням як продукту харчування, як вона колись позиціонувалася. Кукурудза ґрунтовно зміцнилася як одна з основних зернових, які активно використовуються в харчовій, індустріальній, тваринницької та медичній галузях.