

# ІНФОРМАЦІЙНЕ ПОВІДОМЛЕННЯ



III науково-практична конференція  
в рамках Всеукраїнського учнівського проекту  
**«ЗБЕРЕЖЕННЯ ПРІСНОЇ ВОДИ І ВОДООЧИЩЕННЯ  
ЯК СКЛАДОВІ СТАЛОГО РОЗВИТКУ УКРАЇНИ»**

**Реєстраційна картка учасника**

**Правила оформлення тез доповідей**

Назва файлу реєстраційної картки складається із прізвища автора-  
доповідача латинськими літерами, наприклад: Shevchenko-PK.doc.

**Реєстраційна картка учасника  
III науково-практичної конференції  
в рамках Всеукраїнського учнівського проекту  
«Збереження прісної води і водоочищення  
як складові сталого розвитку України»**

Прізвище, ім'я, по батькові: \_\_\_\_\_

\_\_\_\_\_

Рік народження: \_\_\_\_\_

Територіальне відділення Малої академії наук України: \_\_\_\_\_

\_\_\_\_\_

Найменування базового позашкільного закладу освіти: \_\_\_\_\_

\_\_\_\_\_

Місце навчання (повна назва установи) \_\_\_\_\_

\_\_\_\_\_

Клас (курс): \_\_\_\_\_

Прізвище, ім'я, по батькові педагогічного керівника: \_\_\_\_\_

\_\_\_\_\_

Прізвище, ім'я, по батькові наукового керівника: \_\_\_\_\_

\_\_\_\_\_

Тема науково-дослідницької роботи: \_\_\_\_\_

\_\_\_\_\_

\_\_\_\_\_

Форма участі у конференції (усна доповідь, стендова доповідь, заочна участь): \_\_\_\_\_

\_\_\_\_\_

Контактний телефон \_\_\_\_\_

\_\_\_\_\_

E-mail: \_\_\_\_\_

## **Правила оформлення тез доповідей**

Назва файлу тез доповідей складається із прізвища автора-доповідача латинськими літерами, наприклад: Shevchenko.doc

Форма участі у конференції: усна доповідь (до 7 хв.), стендова доповідь, заочна участь.

Робочі мови конференції: *українська, російська, англійська.*

Матеріали тез повинні бути представлені в електронному вигляді, обсягом 1-2 сторінок друкованого тексту, шрифтом Times New Roman текстового редактору Word розміром 14 з полуторним міжрядковим інтервалом . Поля: зверху, знизу, зліва та справа – по 2 см.

Зміст та результати досліджень мають бути викладені стисло, логічно та аргументовано.

Матеріали конференції будуть опубліковані у формі електронного збірника.

Оргкомітет залишає за собою право не друкувати тези, подані поза тематикою, оформлені з порушенням правил та одержані після вказаного терміну.

*З повагою, оргкомітет конференції*

## ТЕЗИ

### **Моделювання рецепторних властивостей полідентатних калікс[4]аренів.**

Пуськов Володимир Олексійович, Київське територіальне відділення МАН України, Київський природничо-наукового ліцей № 145, 11-В клас.

Науковий керівник: Шиванюк Олександр Миколайович, доктор хімічних наук, професор кафедри супрамолекулярної хімії ІВТ КНУ ім. Т. Г. Шевченка.

**Актуальність.** Функціоналізація каліксаренів додатковими центрами комплексоутворення дозволяє отримати широкий ряд молекулярних та йонних рецепторів. Використання в ролі комплексуютьовачів фосфорильованих калікс[4]аренів, здатних залучати Р=О групи, розміщені на верхньому вінці макроциклічного кістяка калікс[4]арену, до кооперативного зв'язування катіону металу є сучасним напрямком розробки та створення екстрагентів. Стабілізація таких комплексів є досить складною задачею та актуальною проблемою сучасної органічної хімії.

**Мета роботи:** дослідження рецепторних властивостей полідентатних калікс[4]аренів методом молекулярної механіки, дослідження методом молекулярного моделювання структури та здатності до комплексоутворення калікс[4]аренів, що містять СМРО і тіо-СМРО угруповання на верхньому вінці макроциклу.

**Висновки.** 1. Методом молекулярного моделювання показано, що калікс[4]арени, які містять на верхньому вінці макроциклу чотири бідентатні СМРО угруповання, знаходяться в конусоподібній конформації і здатні кооперативно зв'язувати катіони металу атомами кисню фосфорильованих груп. 2. Показано, що калікс[4]арени, які функціоналізовані по верхньому вінцю макроциклу полідентатними фосфіноксидними СМРО і тіо-СМРО угрупованнями, є ефективними комплексуютьовачами, які здатні екстрагувати ітрій. 3. Показано, що тільки силове поле ММХ дає розрахункові

результати, які добре узгоджуються з експериментальними даними (екстракція, ЯМР-спектроскопія), а такі силові поля як MMFF94, MM3, Amber не можуть бути використано для розрахунку комплексів внаслідок недосконалої параметризації.