III Міжнародний науковий форум вчених
"Схід - Захід" 11 січня 2019 року

THE THIRD INTERNATIONAL SCIENTIFIC CONGRESS OF SCIENTISTS OF EUROPE

as part of the III International Scientific Forum of Scientists "East - West"
(Austria - Russia - Kazakhstan - Canada - Ukraine - Czech Republic)

11th January 2019

Vienna, Austria

2019

“The Third International scientific congress of scientists of Europe”. Proceedings of the III International Scientific Forum of Scientists "East–West" (January 11, 2019). Premier Publishing s.r.o. Vienna. 2019. 1253 p.

ISBN 978-3-903197-91-6

The recommended citation for this publication is:
Anohin I., Calculation of resource of cross-cutting steel girder elements with initial defects//Proceedings of the 3rd International scientific congress of scientists of Europe. Premier Publishing s.r.o. Vienna. 2019. Pp. 12 – 17.

Editor Lucas Koenig, Austria

Editorial board
Abdulkasimov Ali, Uzbekistan
Adieva Aynura Abduzhalalovna, Kyrgyzstan
Arabaev Cholponkul Isaevich, Kyrgyzstan
Zagir V. Atayev, Russia
Akhmedova Raziyat Abdullayevna
Balabiev Kairat Rahimovich, Kazakhstan
Barlybaeva Saule Hatiyatovna, Kazakhstan
Bestugin Alexander Roaldovich, Russia
Boselin S.R. Prabhu, India
Bondarenko Natalia Grigorievna, Russia
Bogolib Tatiana Maksimovna, Ukraine
Bulatbaeva Aygul Abdimazhitovna, Kazakhstan
Chiladze George Bidzinovich, Georgia
Dalibor M. Elezović, Serbia
Gurov Valeriy Nikolaevich, Russia
Hajiyev Mahammad Shahbaz oglu, Azerbaijan
Ibragimova Liliya Ahmatyanovna, Russia
Blahun Ivan Semenovich, Ukraine
Ivannikov Ivan Andreevich, Russia
Jansarayeva Rima, Kazakhstan
Khubaev Georgy Nikolaevich
Khurtsidze Tamila Shalvovna, Georgia
Khoutyz Zaur, Russia
Khoutyz Irina, Russia
Korzh Marina Vladimirovna, Russia
Kocherbaeva Aynura Anatolevna, Kyrgyzstan
Kushaliyev Kaisar Zhalitovich, Kazakhstan
Lekerova Gulsim, Kazakhstan
Melnichuk Marina Vladimirovna, Russia
Meymanov Bakyt Kattoevich, Kyrgyzstan
Moldabek Kulakhmet, Kazakhstan
Morozova Natalay Ivanovna, Russia
Moskvin Victor Anatolevich, Russia
Nagiyev Polad Yusif, Azerbaijan
Naletova Natalia Yurevna, Russia
Novikov Alexei, Russia
Salaev Sanatbek Komiljanovich, Uzbekistan
Shadiev Rizamat Davranovich, Uzbekistan
Shhahutova Zarema Zorievna, Russia
Soltanova Nazilya Bagir, Azerbaijan
Spasennikov Boris Aristarkhovich, Russia
Spasennikov Boris Aristarkhovich, Russia
Suleymanov Suleyman Fayzullaevich, Uzbekistan
Suleymanova Rima, Russia
Tereschenko-Kaidan Liliya Vladimirovna, Ukraine
Tsersvadze Mzia Giglaevna, Georgia
Vijaykumar Muley, India
Yurova Kseniya Igorevna, Russia
Zhaplova Tatiana Mikhaylovna, Russia
Zhdanovich Alexey Igorevich, Ukraine

Proofreading Andrey Simakov

Cover design Andreas Vogel

Material disclaimer

The opinions expressed in the conference proceedings do not necessarily reflect those of the Premier Publishing s.r.o., the editor, the editorial board, or the organization to which the authors are affiliated.

© Premier Publishing s.r.o.
Центр наукових публікацій «SOLUTION»

All rights reserved; no part of this publication may be reproduced, stored in a retrieval system, or transmitted in any form or by any means, electronic, mechanical, photocopying, recording, or otherwise, without prior written permission of the Publisher.
Premier Publishing s.r.o. is not responsible for the stylistic content of the article. The responsibility for the stylistic content lies on an author of an article.

Typeset in Berling by Ziegler Buchdruckerei, Linz, Austria.
Printed by Premier Publishing s.r.o., in Vienna, Austria on acid-free paper.

	ПОВ’ЯЗАНИХ ІЗ НЕЗАКОННИМ ОБІГОМ НАРКОТИЧИХ ЗАСОБІВ, ПСИХОТРОПНИХ РЕЧОВИН ТА ПРЕКУРСОРІВ.	
126.	MARIANA POPYK. THE ROLE AND FACTORS OF STAFF MOTIVATION IN THE MANAGEMENT SYSTEM OF HOSPITALITY INDUSTRY.	929
127.	ЯРЧУК А.В. МОДЕЛЮВАННЯ ТА ПРОГНОЗУВАННЯ ВПЛИВУ ПРОДУКТИВНОСТІ ПРАЦІ НА ЯКІСТЬ ЖИТТЯ.	935
128.	ПАХОЛЮК О.А., ОСТАШУК Н.О. ДОСЛІДЖЕННЯ ЕФЕКТИВНОСТІ СПОСОБІВ УТЕПЛЕННЯ ЦОКОЛЬНИХ ТА ПІДВАЛЬНИХ ПРИМІЩЕНЬ.	945
129.	ДАВИДОВИЧ І. М. ОКРЕМІ АСПЕКТИ ПРОВЕДЕННЯ НЕГЛАСНИХ СЛІДЧИХ (РОЗШУКОВИХ) ДІЙ ПРИ ПРОВЕДЕННІ РОЗСЛІДУВАННЯ У ЗЛОЧИНАХ, ПОВ’ЯЗАНИХ ІЗ НЕЗАКОННИМ ОБІГОМ НАРКОТИЧИХ ЗАСОБІВ, ПСИХОТРОПНИХ РЕЧОВИН ТА ПРЕКУРСОРІВ.	955
130.	ZAHORULKO S., SHMYCHKOVA O., LUK’YANENKO T., VELICHENKO A. COMPOSITION AND STABILITY OF SODIUM HYPOCHLORITE SOLUTIONS FOR MEDICAL APPLICATION.	965
131.	ФЕДОРЕНКО О.І., МАРИКІВСЬКА Г.А. КУЛЬТУРНЕ МОВЛЕННЄВЕ СЕРЕДОВИЩЕ ЯК УМОВА ФОРМУВАННЯ МОВЛЕННЄВОЇ КУЛЬТУРИ КУРСАНТІВ І СТУДЕНТІВ У ЗВО.	974
132.	БЛАЖІВСЬКА М.А. НОРМАТИВНО-ПРАВОВЕ ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ РОЗВИТКУ ТЕРИТОРІАЛЬНИХ ГРОМАД.	983
133.	БОРИСОВА О.В. ДЕЯКІ ЛЕКСИЧНІ ТРУДНОЩІ ПЕРЕКЛАДУ МІЖНАРОДНИХ УГОД З АГЛІЙСЬКОЇ МОВИ НА УКРАЇНСЬКУ: КСЕНІЗМИ, КОНЕКТОРИ-АРХАЇЗМИ, КЛІШЕ.	989
134.	МЕЛЬНИК Я.В. КОМПЕТЕНТНІСТЬ ЯК КЛАДОВА ПРОФЕСІЙНОГО РОЗВИТКУ ПУБЛІЧНИХ СЛУЖБОВЦІВ ДЕРЖАВНОЇ СЛУЖБИ ЗАЙНЯТОСТІ УКРАЇНИ.	997
135.	ІЛЬЧЕНКО А. С., ВАРЕНИК Б. Ф. СТВОРЕННЯ ВИХІДНОГО СЕЛЕКЦІЙНОГО МАТЕРІАЛУ СТІЙКОГО ДО СУЛЬФОНІЛСЕЧОВИННОЇ ТА ІМІДАЗОЛІНОНОВОЇ ГРУП ГЕРБІЦИДІВ В СГІ-НЦНС (м. Одеса, Україна).	1003
136.	ПЕРЕХОДА Л. О., ЄРЬОМІНА Г. О., ЄРЬОМІНА З. Г., ШЕЙКІНА Н. В., КРАСОВСЬКИЙ І. В., КРАСОВСЬКА М. В., СТОРОЖЕНКО І. П. КВАНТОВО-ХІМІЧНІ РОЗРАХУНКИ ТЕРМОДИНАМІЧНИХ ПАРАМЕТРІВ ПЕРЕХІДНИХ СТАНІВ ТАУТОМЕРІВ N,N′-ДИЗАМІЩЕНОЇ ТІОСЕЧОВИНИ У РЕАКЦІЇ ЦИКЛІЗАЦІЇ ПРИ ВИКОРИСТАННІ РІЗНИХ РОЗЧИННИКІВ.	1008

КВАНТОВО-ХІМІЧНІ РОЗРАХУНКИ ТЕРМОДИНАМІЧНИХ ПАРАМЕТРІВ ПЕРЕХІДНИХ СТАНІВ ТАУТОМЕРІВ N,N′-ДИЗАМІЩЕНОЇ ТІОСЕЧОВИНИ У РЕАКЦІЇ ЦИКЛІЗАЦІЇ ПРИ ВИКОРИСТАННІ РІЗНИХ РОЗЧИННИКІВ

ПЕРЕХОДА Л. О.
доктор фармацевтичних наук, професор,
професор кафедри медичної хімії
Національний фармацевтичний університет
м. Харків, Україна

ЄРЬОМІНА Г. О.
кандидат фармацевтичних наук, асистент,
асистент кафедри медичної хімії
Національний фармацевтичний університет
м. Харків, Україна

ЄРЬОМІНА З. Г.
кандидат фармацевтичних наук, доцент,
доцент кафедри медичної хімії
Національний фармацевтичний університет
м. Харків, Україна

ШЕЙКІНА Н. В.
кандидат біологічних наук,
викладач кафедри фізики
Національний фармацевтичний університет
м. Харків, Україна

КРАСОВСЬКИЙ І. В.
кандидат фізико-математичних наук,
старший викладач кафедри фізики
Національний фармацевтичний університет
м. Харків, Україна

КРАСОВСЬКА М. В.
старший співробітник
Науковий інститут «Інститут монокристалів» НАН
м. Харків, Україна

СТОРОЖЕНКО І. П.
доктор фізико-математичних наук, професор,
професор кафедри фізики
Національний фармацевтичний університет
м. Харків, Україна

Вступ. Для вивчення будови і реакційної здатності органічних сполук широко використовуються сучасні квантово-хімічні методи [1-3]. Один з найбільш важливих і цікавих напрямків їх використання пов'язаний з вивченням перебігу хімічних реакцій. Результати теоретичного дослідження дозволяють доповнити і поглибити інтерпретацію експерименту, а в ряді випадків вдосконалити його, використовуючи в синтезі більш придатний розчинник.

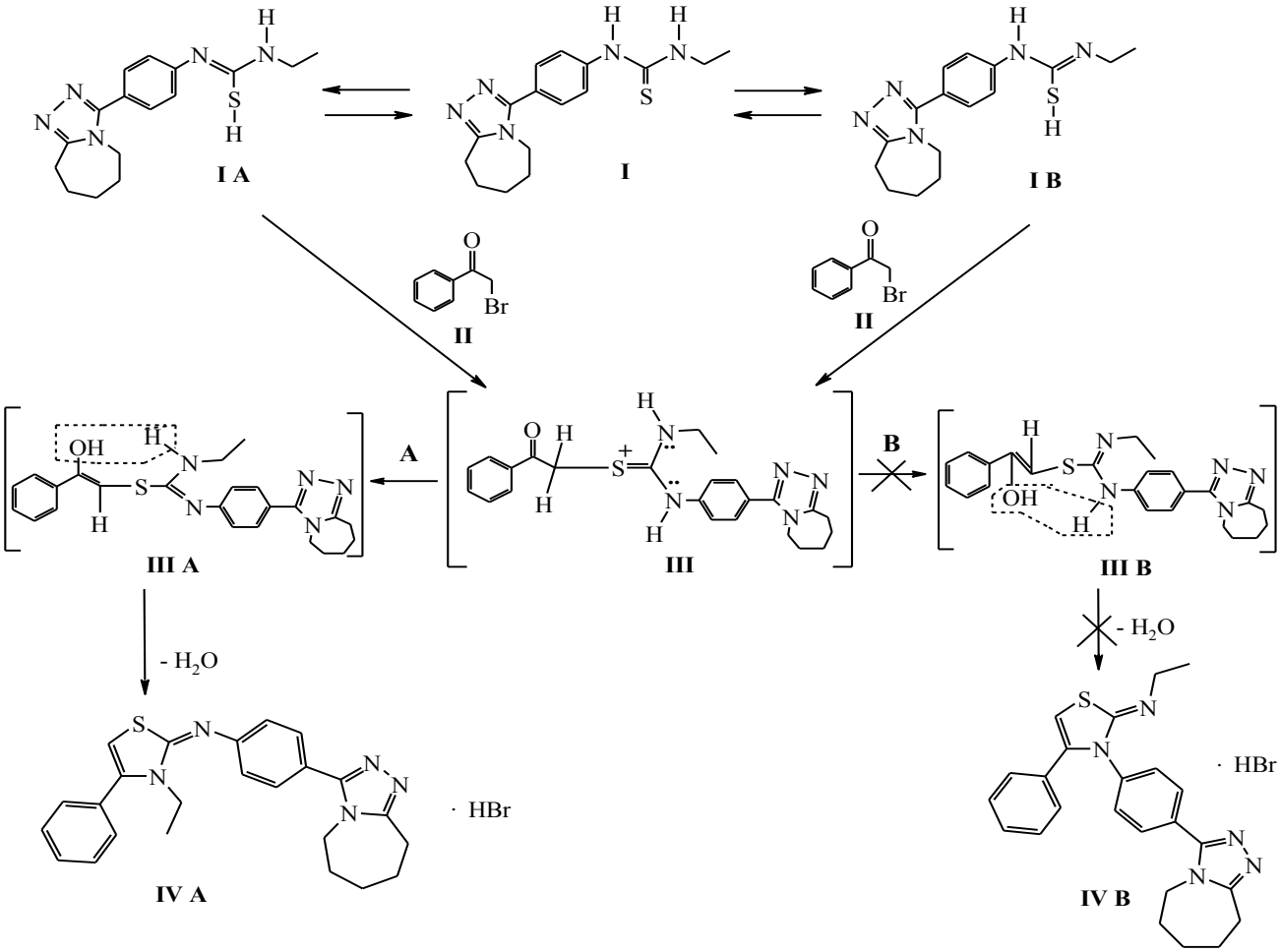
Проведене раніше дослідження щодо доведення регіоселективності перебігу циклізації 1-етил-3-[4-(6,7,8,9-тетрагідро-5*H*-[1,2,4]триазоло[4,3-*a*]азепін-3-іл)феніл]тіосечовини з 2-бромо-1-фенілетаноном у середовищі води та без розчинника показало перспективність застосування квантово-хімічних розрахунків електронної структури, геометрії і термодинамічних параметрів перехідних станів таутомерів вихідної N,N′-дизаміщеної тіосечовини, що було

підтверджено результатами фізико-хімічних досліджень одержаного продукту циклізації [4].

Наступним етапом дослідження стало теоретичне обґрунтування напрямку перебігу даної реакції при проведенні синтезу в різних розчинниках. Підбір оптимального розчинника для проведення синтезу здійснювали шляхом обчислення термодинамічних параметрів вихідних таутомерів в етанолі, ДМФА, діоксані та тетрахлорметані з використанням ліцензійного програмного продукту Gaussian W09, Revision A.02.

Мета дослідження. Теоретичне обґрунтування напрямку проходження реакції циклізації [5, 6] в різних розчинниках за допомогою квантово-хімічних розрахунків термодинамічних параметрів трьох таутомерів 1-етил-3-[4-(6,7,8,9-тетрагідро-5*H*-[1,2,4]триазоло[4,3-*a*]азепін-3-іл)феніл]тіосечовини (Схема).

Схема 1



Методи. Квантово-хімічні розрахунки відносних енергій, бар'єрів взаємоперетворення, структурних і термодинамічних параметрів таутомерів вихідної тіосечовини у середовищі діоксану, етанолу, ДМФА та тетрахлорметану були обчислені методами теорії функціонала густини з використанням програми GAUSSIAN 09W [7]. Вплив розчинника враховували у рамках моделі континууму, що поляризується.

Результати. Згідно одержаних результатів, в усіх досліджуваних розчинниках реакція циклізації має проходити в одному напрямку з утворенням гідроброміду 3-етил-4-феніл-N-[4-(6,7,8,9-тетрагідро-5*H*-[1,2,4]триазоло[4,3-*a*]азепін-3-іл)феніл]-1,3-тіазол-2(3*H*)-іміну ***IVA***. Найменший бар'єр взаємоперетворення таутомерів вихідної тіосечовини повинен спостерігатися при використанні як розчинника діоксану, що свідчить про перевагу проведення синтезу саме у цьому розчиннику порівняно з етанолом, водою, тетрахлорметаном та ДМФА.

Висновки. Одержані результати квантово-хімічних розрахунків свідчать про те, що в усіх досліджуваних розчинниках (діоксані, етанолі, ДМФА, тетрахлорметані, воді) реакція циклізації теоретично перебігатиме з утворенням гідроброміду 3-етил-4-феніл-N-[4-(6,7,8,9-тетрагідро-5*H*-[1,2,4]триазоло[4,3-*a*]азепін-3-іл)феніл]-1,3-тіазол-2(3*H*)-іміну ***IVA***. Теоретично обґрунтовано, що для проведення синтезу найбільш доцільним є використання як розчинника діоксану. Запропоновано для використання в подальших дослідженнях методу квантово-хімічних розрахунків M06-2X як більш достовірного.

Використана література

1. А. Г. Давтян, Р. С. Асатрян, С. Д. Арсентьев, А. А. Манташян.Изучение поверхности потенциальной энергиивзаимодействия атома кислорода с этиленом. Химический журнал Армении. 68, №3, 2015. С. 358-366.

2. Solid solution of two diastereomers of [3a(R,S),7a(R,S)]-3-[(100R)-1-phenylethyl]perhydro-1,3-benzothiazol-2-iminium chloride. Agnieszka Plutecka,

Urszula Rychlewska, Natalia Prusinowska and Jacek Gawron´ ski. doi:10.1107/S0108768110040760 Acta Cryst. (2010). B66, 678–686.

3. Umape PG, Patil VS, Padalkar VS, Phatangare KR, Gupta VD, Thate AB, Sekar N. Synthesis and Characterisation of Novel Yellow Azo Dyes from 2-Morpholin-4-yl-1,3-thiazol-4(5*H*)-one and Study of Their Azo-Hydrazone Tautomerism, Dyes and Pigments (2013), P. 1-70. doi: 10.1016/j.dyepig.2013.05.002.

4. The presentation of regioselectivity of 1-ethyl-3-[4-(6,7,8,9-tetrahydro-5*H*-[1,2,4]triazolo[4,3-a]azepin-3-yl)phenyl]thiourea cyclization with α-bromoketone / L. O. Perekhoda, H. O. Yeromina, I. P. Storozhenko, N. V. Sheykina, I. V. Krasovskyi, M. V. Krasovska, S. A. Demchenko. *Журн. орг. та фармац. хімії*. 2017. Т.15, № 1 (57). С. 58-63.

5. Демченко С. А., Єрьоміна Г. О., Перехода Л. О., Ядловський О. Є., Бобкова Л. С., Демченко А. М. Гідробромід (3-етил-4-феніл-3*H*-тіазол-2-іліден)-[4-(6,7,8,9-тетрагідро-5*H*-[1,2,4]триазоло[4,3-а]азепін-3-їл)феніл]аміну, що проявляє анальгезуючу активність: пат. 111015 Україна. № u 2016 04704; заявл. 26.04.2016; опубл. 25.10.2016, Бюл. №20.

6. Синтез та анальгезуючі властивості похідних (3-алліл-4-арил-3Н-тіазол-2-іліден)-[4-(6,7,8,9-тетрагідро-5Н-[1,2,4]триазоло[4,3-а]азепін-3-їл)феніл]амінів / С. А. Демченко, Г. О. Єрьоміна, Л. О. Перехода, Т. А. Бухтіарова, Л. С. Бобкова, А. М. Демченко. *Фармац. журн*. 2017. №1. С. 67–73.

5. Gaussian 09, Revision A.02, M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, G. E. Scuseria, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, G. Scalmani, V. Barone, G. A. Petersson, H. Nakatsuji, X. Li, M. Caricato, A. Marenich, J. Bloino, B. G. Janesko, R. Gomperts, B. Mennucci, H. P. Hratchian, J. V. Ortiz, A. F. Izmaylov, J. L. Sonnenberg, D. Williams-Young, F. Ding, F. Lipparini, F. Egidi, J. Goings, B. Peng, A. Petrone, T. Henderson, D. Ranasinghe, V. G. Zakrzewski, J. Gao, N. Rega, G. Zheng, W. Liang, M. Hada, M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda, J. Hasegawa, M. Ishida, T. Nakajima, Y. Honda, O. Kitao, H. Nakai, T. Vreven, K. Throssell, J. A.

Montgomery, Jr., J. E. Peralta, F. Ogliaro, M. Bearpark, J. J. Heyd, E. Brothers, K. N. Kudin, V. N. Staroverov, T. Keith, R. Kobayashi, J. Normand, K. Raghavachari, A. Rendell, J. C. Burant, S. S. Iyengar, J. Tomasi, M. Cossi, J. M. Millam, M. Klene, C. Adamo, R. Cammi, J. W. Ochterski, R. L. Martin, K. Morokuma, O. Farkas, J. B. Foresman, and D. J. Fox, Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2016.