

**В. А. Бабкин, Д. С. Кучеренко, Д. С. Андреев,  
Н. С. Минаев, Р. Д. Зеренинов, В. С. Белоусова,  
М. И. Арцис, Е. С. Титова, Н. А. Шрейберт**

### **КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ РАСЧЁТ НЕКОТОРЫХ МОЛЕКУЛ СПИРТА МЕТОДОМ DFT**

*Ключевые слова: квантово-химический расчет, метод DFT:PBE0/6-311G\*\*, метиловый, этиловый, изопропиловый, трет-бутиловый спирт, кислотная сила.*

*В этой работе выполнено первое квантово-химическое исследование ряда спиртов (метилового, этилового, изопропилового и трет-бутилового) с применением классического подхода DFT в базисном наборе 6-311G. Процесс оптимизации геометрии молекул велся по всем параметрам с использованием стандартного градиентного метода. Хотя синтез данных спиртов был осуществлен свыше столетия назад (первые синтезы относятся к середине XIX века), квантово-химическая оценка этих соединений методом DFT ранее не проводилась. Метод DFT, базирующийся на теории функционала плотности и позволяющий вычислять электронную плотность и энергию молекулярной системы, был предложен В. Коном и Л. Шэмом более пятидесяти лет назад (в 1965 году). В результате исследования получены оптимизированные геометрические и электронные структуры изученных спиртов. Теоретически рассчитана их кислотная сила ( $pK_a = 15-17$ ), что свидетельствует о том, что молекулы представляют собой очень слабые водородные кислоты. Выяснено, что кислотная сила в рассматриваемой серии спиртов лишь незначительно зависит от степени разветвления радикалов либо от природы самих спиртов.*

**V. A. Babkin, D. S. Kucherenko, D. S. Andreev,  
N. S. Minaev, R.D. Zereninov, V. S. Belousova,  
M. I. Artsi, E. S. Titova, N. A. Schreibert**

### **QUANTUM-CHEMICAL CALCULATION OF SOME ALCOHOL MOLECULES**

#### **BY THE DFT METHOD**

*Keywords: quantum-chemical calculation, DFT:6-311G\*\*, methyl, ethyl, isopropyl, tert-butyl alcohol, acid strength.*

*In this work, the first quantum-chemical study of a series of alcohols (methyl, ethyl, isopropyl, and tert-butyl) was performed using the classical DFT approach in the 6-311G basis set. The geometry optimization of the molecules was performed using the standard gradient method. Although these alcohols were synthesized over a century ago (the first syntheses date back to the mid-19th century), no quantum-chemical evaluation of these compounds using DFT had been performed previously. The DFT method, based on density functional theory and allowing for the calculation of the electronic density and energy of a molecular system, was proposed by A. Kohn and L. Sham more than fifty years ago (in 1965). As a result of the study, the optimized geometric and electronic structures of the studied alcohols were obtained. The theoretical calculation of their acid strength ( $pK_a = 15-17$ ) indicates that these molecules are very weak hydrogen acids. It was found that the acid strength*

#### **Введение**

Спиртами называют класс органических соединений, содержащих гидроксильную группу (-ОН), соединённую непосредственно с углеводородным радикалом. В зависимости от строения и расположения гидроксила различают первичные, вторичные и третичные спирты. Рассмотрим наиболее распространённые представители этой группы веществ: этиловый, метиловый, изопропиловый и трет-бутиловый спирты.

##### **I. Метанол (СН<sub>3</sub>ОН) – метиловый спирт**

Метанол является простым представителем **первичных спиртов**, представляя собой наименьшую молекулу среди всех спиртов. Молекула содержит один атом углерода, три атома водорода и гидроксильную группу.

Физико-химические характеристики:

- Внешний вид: прозрачная жидкость с выраженным раздражающим запахом.
- Температура кипения: +64,7 °С.
- Плотность: 0,791 г/мл.
- Высокая летучесть и пожароопасность.

– Хорошо растворим в воде и большинстве органических растворителей.

– Используется преимущественно в промышленных целях:

– Производство формальдегида и уксусной кислоты;

– Компонент антиобледенителей, антифризов и стеклоочистителей;

– Сырьё для изготовления пластмасс и лакокрасочных материалов.

Метанол чрезвычайно токсичен. Попадание в организм даже небольших количеств (около 10 мл) способно вызывать тяжёлую интоксикацию, поражение глаз вплоть до полной потери зрения и смерть. Причина отравления связана с метаболизмом метанола до формальдегида и муравьиной кислоты, оказывающих разрушительное действие на ткани органов.

##### **II. Этанол (С<sub>2</sub>Н<sub>5</sub>ОН) – этиловый спирт**

Этанол является простейшим представителем первичных спиртов. Его молекула состоит из двух атомов углерода, пяти атомов водорода и одной гидроксильной группы. Углеводородный фрагмент

представляет собой цепь, к которой прикреплена гидроксильная группа.

Физико-химические характеристики:

– Внешний вид: прозрачный бесцветный жидкий продукт с приятным специфическим запахом.

– Температура кипения: +78,3 °С.

– Плотность: 0,789 г/мл.

– Растворимость - хорошо смешивается с водой и большинством органических растворителей.

– Реакционная способность - способен вступать в реакции дегидратации, окисления, замещения гидроксильной группы.

Этанол находит широкое применение благодаря своим уникальным свойствам:

– В алкогольной продукции (водка, вино, пиво);

– Как антисептическое средство в медицинской практике;

– В фармацевтической промышленности для производства лекарств;

– Как реактив в лабораторной практике;

– В составе топлива (биотопливо, смеси с бензином).

При попадании в организм оказывает сильное влияние на центральную нервную систему, вызывая угнетение функций мозга и торможение рефлексов. Длительное употребление может вызвать хроническую интоксикацию и развитие алкоголизма.

### III. Пропанол-2 (C<sub>3</sub>H<sub>7</sub>OH) – изопропиловый спирт

Изопропиловый спирт относится к группе **вторичных спиртов**, поскольку гидроксильная группа расположена рядом с двумя соседними углеродными атомами. В структуре присутствуют три атома углерода и семь атомов водорода.

Физико-химические характеристики:

– Внешний вид - прозрачная бесцветная жидкость с характерным резким запахом.

– Температура кипения - +82,4 °С.

– Плотность: около 0,785 г/мл.

– Легко испаряется и обладает хорошей растворимостью в воде.

– Широко востребован в бытовом хозяйстве и медицинских учреждениях:

– Дезинфекция кожи перед инъекциями и операциями;

– Средства личной гигиены (лосьоны, кремы, дезодоранты);

– Составляющими многих чистящих растворов и бытовых химикатов.

Менее токсичен, чем метанол, но также опасен при приёме внутрь или регулярном воздействии высоких концентраций паров. Оказывает наркотическое действие, может вызвать раздражение слизистых оболочек дыхательных путей и кожи.

### IV. Трет-бутанол ((CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub>COH) – трет-бутиловый спирт

Трет-бутанол принадлежит классу третичных спиртов, отличаюсь расположением гидроксильной группы, связанной с терцированным углеродным центром, окружённым тремя алкильными группами.

Физико-химические характеристики:

– Внешний вид: вязкая жидкость с едким запахом.

– Температура кипения - +82,4 °С.

– Плотность - примерно 0,786 г/мл.

– Ограниченная растворимость в воде, хорошая совместимость с органическими растворителями.

– Высокая устойчивость к действию окислителей и кислот, низкая реакционная способность по сравнению с первичными и вторичными спиртами.

– Основное назначение связано с производством специализированных продуктов:

– Промежуточный реагент в получении биологически активных веществ и лекарственных препаратов;

– Добавление в композиции парфюмерных композиций и пищевых добавок;

– Важный антиоксидант и стабилизатор полимеров [1].

Несмотря на то, что изучаемые спирты были синтезированы в 19-20 века [2-5], квантово – химический расчет методом DFT-PBE0 [9-11], за который 1998 гг Кон В. получил Нобелевскую премию[6], в базисе 6-311G\*\* наилучшим образом учитывающим корреляцию электронов [7] до сих пор не были выполнены. Поэтому целью настоящей работы является квантово – химический расчет вышеперечисленных спиртов этим методом

### Результаты расчетов

С помощью метода DFT-PBE0 и базиса 6-311G были рассчитаны оптимальные геометрические и электронные параметры, а также общая и электронная энергии молекулы метилового спирта. Эти результаты представлены на рисунках 1-4 и в таблицах 1-4. Используя формулу DFT:PBE0/6-311G для расчета pKa ( $pKa = 51.048 - 150.078q_{\max}^{H+}$ ), и зная максимальный заряд на атоме водорода ( $q_{\max}^{H+}$ ) для метилового спирта (+0.238, табл. 1), этилового спирта (+0.237, табл. 2), изопропилового спирта (+0.233, табл. 3) и трет-бутилового спирта (+0.230, табл. 4), были определены значения кислотности pKa, равные 15, 15, 16 и 17 соответственно.

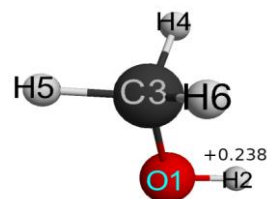


Рис. 1 - Геометрическое и электронное строение молекулы метилового спирта ( $E_0 = -303504$  кДж/моль,  $E_{эл} = -409669$  кДж/моль)

Fig. 1 - Geometric and electronic structure of the methyl alcohol molecule ( $E_0 = -303504$  kJ/mol,  $E_{el} = -409669$  kJ/mol)

Наше исследование впервые представляет собой квантово-химический анализ молекул метанола, этанола, изопропанола и трет-бутанола. Расчеты проводились с применением метода DFT и базиса 6-311G\*\*, с последующей полной оптимизацией геометрии молекул с помощью стандартного гради-

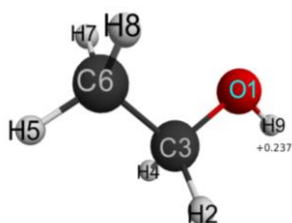


Рис. 2 - Геометрическое и электронное строение молекулы этилового спирта ( $E_0 = -406616$  кДж/моль,  $E_{эл} = -622050$  кДж/моль)

Fig. 2 - Geometric and electronic structure of the ethyl alcohol molecule ( $E_0 = -406616$  kJ/mol,  $E_{el} = -622050$  kJ/mol)

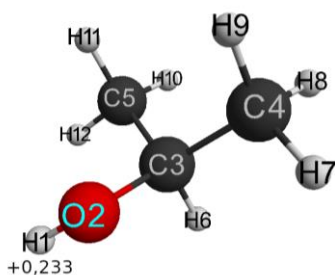


Рис. 3 - Геометрическое и электронное строение молекулы изопропилового спирта ( $E_0 = -509729$  кДж/моль,  $E_{эл} = -864609$  кДж/моль)

Fig. 3 - Geometric and electronic structure of the isopropyl alcohol molecule ( $E_0 = -509729$  kJ/mol,  $E_{el} = -864609$  kJ/mol)

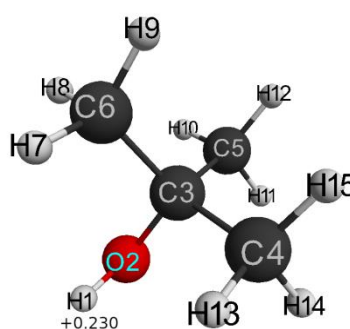


Рис. 4 - Геометрическое и электронное строение молекулы трет-бутилового спирта ( $E_0 = -612838$  кДж/моль,  $E_{эл} = -1137784$  кДж/моль)

Fig. 4 - Geometric and electronic structure of the tert-butyl alcohol molecule ( $E_0 = -612838$  kJ/mol,  $E_{el} = -1137784$  kJ/mol)

ентного подхода. Это позволило определить их оптимальные геометрические и электронные структуры. Теоретическая оценка кислотной силы ( $pK_a = 15, 15, 16, 17$ ) подтвердила, что данные спирты относятся к классу очень слабых Н-кислот ( $pK_a > 14$ ). Результаты наших расчетов демонстрируют хорошее качественное и количественное соответствие с ранее полученными данными методом CNDO/2 (параметризация Сантри-Попла-Сегала [12]).

Таблица 1 - Оптимизированные длины связей, валентные углы и заряды на атомах молекулы метилового спирта, полученные методом DFT:PBE0/6-311G\*\*

Table 1 - Optimized bond lengths, bond angles and charges on the atoms of the methyl alcohol molecule obtained by the method DFT:PBE0/6-311G\*\*

Длины связей	R, Å	Валентные углы	Град	Атом	Заряды на атомах молекулы
O(1)-H(2)	0,96	H(2)-O(1)-C(3)	108	O(1)	-0,402
O(1)-C(3)	1,41	O(1)-C(3)-H(4)	113	H(2)	+0,238
C(3)-H(4)	1,10	O(1)-C(3)-H(5)	107	C(3)	-0,157
C(3)-C(5)	1,10	O(1)-C(3)-H(6)	113	H(4)	+0,099
C(3)-C(6)	1,10			H(5)	+ 0,123
				H(6)	+0,099

Таблица 2 - Оптимизированные длины связей, валентные углы и заряды на атомах молекулы этилового спирта, полученные методом DFT:PBE0/6-311G\*\*

Table 2 - Optimized bond lengths, bond angles and charges on the atoms of the ethyl alcohol molecule obtained by the method DFT:PBE0/6-311G\*\*

Длины связей	R, Å	Валентные углы	Град	Атом	Заряды на атомах молекулы
H(9)-O(1)	0,96	H(9)-O(1)-C(3)	108	O(1)	-0.397
O(1)-C(3)	1,42	O(1)-C(3)-H(4)	111	H(2)	+0.101
C(3)-H(2)	1,10	O(1)-C(3)-H(2)	111	C(3)	-0.057
C(3)-H(4)	1,10	C(3)-C(6)-H(5)	111	H(4)	+0.101
C(3)-C(6)	1,51	C(3)-C(6)-H(7)	110	H(5)	+0.116
C(6)-H(5)	1,09	C(3)-C(6)-H(8)	110	C(6)	-0.360
C(6)-H(7)	1,09	O(1)-C(3)-C(6)	108	H(7)	+0.130
C(6)-H(8)	1,09			H(8)	+0.130
				H(9)	+0.237

Таблица 3 - Оптимизированные длины связей, валентные углы и заряды на атомах молекулы изопропилового спирта, полученные методом DFT:PBE0/6-311G\*\*

Table 3 - Optimized bond lengths, bond angles and charges on the atoms of the isopropyl alcohol molecule obtained by the method DFT:PBE0/6-311G\*\*

Длины связей	R, А	Валентные углы	Град	Атом	Заряды на атомах молекулы
H(1)-O(2)	0,96	H(1)-O(2)-C(3)	108	H(1)	+0,233
O(2)-C(3)	1.42	O(2)-C(3)-C(5)	111	O(2)	-0,388
C(3)-H(6)	1.10	O(2)-C(3)-H(6)	110	C(3)	-0,024
C(3)-C(5)	1,52	C(3)-C(5)-H(10)	111	C(4)	-0,323
C(5)-H(10)	1,09	C(3)-C(5)-H(11)	110	C(5)	-0,336
C(5)-H(11)	1,09	C(3)-C(5)-H(12)	111	H(6)	+0,111
C(5)-H(12)	1,10	H(12)-C(5)-H(10)	108	H(7)	+0,133
C(3)-C(4)	1,51	H(12)-C(5)-H(11)	108	H(8)	+0,115
C(4)-H(7)	1,09	H(11)-C(5)-H(10)	109	H(9)	+0,124
C(4)-H(8)	1,09	O(2)-C(3)-C(4)	106	H(10)	+0,119
C(4)-H(9)	1,09	C(3)-C(4)-H(7)	110	H(11)	+0,127
		C(3)-C(4)-H(8)	111	H(12)	+0,110
		C(3)-C(4)-H(9)	110		
		H(7)-C(4)-H(8)	109		
		H(7)-C(4)-H(9)	108		
		H(8)-C(4)-H(9)	109		

Таблица 4 - Оптимизированные длины связей, валентные углы и заряды на атомах молекулы трет-бутилового спирта, полученные методом DFT:PBE0/6-311G\*\*

Table 4 - Optimized bond lengths, bond angles and charges on the atoms of the tert-butyl alcohol molecule obtained by the method DFT:PBE0/6-311G\*\*

Длины связей	R, А	Валентные углы	Град	Атом	Заряды на атомах молекулы
H(1)-O(2)	0,96	H(1)-O(2)-C(3)	107	H(1)	+0,230
O(2)-C(3)	1,43	O(2)-C(3)-C(4)	110	O(2)	-0,385
C(3)-C(4)	1,53	O(2)-C(3)-C(5)	105	C(3)	-0,063
C(4)-H(13)	1,10	O(2)-C(3)-C(6)	110	C(4)	-0,290
C(4)-H(14)	1,09	C(3)-C(4)-H(13)	111	C(5)	-0,286
C(4)-H(15)	1,09	C(3)-C(4)-H(14)	110	C(6)	-0,290
C(3)-C(5)	1,52	C(3)-C(4)-H(15)	112	H(7)	+0,106
C(5)-H(10)	1,09	C(3)-C(5)-H(10)	110	H(8)	+0,131
C(5)-H(11)	1,09	C(3)-C(5)-H(11)	110	H(9)	+0,118
C(5)-H(12)	1,09	C(3)-C(5)-H(12)	111	H(10)	+0,129
C(3)-C(6)	1,53	C(3)-C(6)-H(7)	111	H(11)	+0,129
C(6)-H(7)	1,10	C(3)-C(6)-H(8)	110	H(12)	+0,115
C(6)-C(8)	1,09	C(3)-C(6)-H(9)	112	H(13)	+0,106
C(6)-H(9)	1,09			H(14)	+0,131
				H(15)	+0,118

Таблица 5 - Общая энергия изучаемых спиртов ( $E_0$ ), общая электронная энергия ( $E_{el}$ ), рKa- универсальный показатель кислотности и максимальный заряд атома водорода-  $q_{max}^{H^+}$ Table 5 - Total energy of the alcohols studied ( $E_0$ ), total electronic energy ( $E_{el}$ ), pKa - universal indicator of acidity and the maximum charge of the hydrogen atom -  $q_{max}^{H^+}$ 

№	Спирт	Общая энергия спиртов ( $E_0$ , кДж/моль)	Общая электронная энергия ( $E_{el}$ , кДж/моль)	pKa	$q_{max}^{H^+}$
1	Метиловый	-303504	-409669	15	+0,238
2	Этиловый	-406616	-622050	15	+0,237
3	Изопропиловый	-509729	-864609	16	+0,233
4	Трет-бутиловый	-612838	-1137784	17	+0,230

## Литература

1. Шаталова Н.И., Хайруллина О.Д., Сайфутдинова М.Н.  
Органическая химия. Галогенпроизводные

углеводородов. Спирты. Фенолы: учебное пособие / Н.И. Шаталова, О.Д. Хайруллина, М.Н. Сайфутдинова;

- Минобрнауки России, Казан. нац. исслед. технол. ун-т. – Казань: Изд-во «Печать-сервис-XXI век», 2023. – 146 с.
2. Метанол / [Электронный ресурс] // Википедия : [сайт]. — URL: <https://ru.wikipedia.org/wiki/Метанол> (дата обращения: 12.11.2025).
  3. Этанол / [Электронный ресурс] // Википедия : [сайт]. — URL: <https://ru.wikipedia.org/wiki/Этанол> (дата обращения: 12.11.2025).
  4. Изопропанол / [Электронный ресурс] // Википедия : [сайт]. — URL: <https://ru.wikipedia.org/wiki/Изопропанол> (дата обращения: 12.11.2025).
  5. Трет – бутиловый спирт / [Электронный ресурс] // Википедия : [сайт]. — URL: [https://ru.wikipedia.org/wiki/Трет – бутиловый спирт](https://ru.wikipedia.org/wiki/Трет_–_бутиловый_спирт) (дата обращения: 12.11.2025).
  6. Кон Вальтер / [Электронный ресурс] // Википедия : [сайт]. — URL: [https://ru.wikipedia.org/wiki/Кон, Вальтер](https://ru.wikipedia.org/wiki/Кон,_Вальтер) (дата обращения: 12.11.2025).
  7. В. Г. Цирельсон. Квантовая химия, Молекулы, молекулярные системы и твердые тела, // М.: Бином, 2010, 422 с.
  8. Квантово – химический расчет некоторых молекул трифторметилстиролов методом DFT. Бабкин В.А., Андреев Д.С., Игнатов А.В., Кожухова А.В., Рахимов А.И., Рахимова Н.А., Белоусова В.С., Титова Е.С., Денисюк А.Р., Прочухан К.Ю. // Фторовые записки. – 2019. № 2 (123). Р. 5-6.
  9. Granovsky A.A. Firefly version 8 [электронный ресурс] // Firefly computational chemistry program, 2013. URL: <https://classic.chem.msu.su/firefly/index.html> (дата обращения: 20.02.2025).
  10. M.W.Schmidt, K.K.Baldrige, J.A.Boatz, S.T.Elbert, M.S.Gordon, J.H.Jensen, S.Koseki, N.Matsunaga, K.A.Nguyen, S.J.Su, T.L.Windus, M.Dupuis, J.A.Montgomery. "General Atomic and Molecular Electronic Structure System". Journal of Computational Chemistry, Vol. 14, 1347-1363(1993). doi:10.1002/jcc.540141112.
  11. B. M. Bode, M. S. Gordon. "MacMolPlt: A graphical user interface for GAMESS". Journal of Molecular Graphics and Modelling, Vol. 16, No. 3, 1998, p. 133-138.
  12. Сангалов Ю.А., Бабкин В.А., Минскер К.С., Нелькинбаум Ю.Я. Квантово-химические исследования фрагментации спиртов в комплексах с различными кислотами. Теоретическая и экспериментальная химия. – 1983. Т. 19. №5, 615-620 с.
  - Phenols: textbook / N.I. Shatalova, O.D. Khairullina, M.N. Sayfutdinova; Ministry of Education and Science of Russia, Kazan. national research technol. univ. – Kazan: Publishing house "Print-service-XXI century", 2023. – 146 p.
  2. Methanol / [Electronic resource] // Wikipedia: [website]. — URL: <https://ru.wikipedia.org/wiki/Methanol> (access date: 2025-11-12).
  3. Ethanol / [Electronic resource] // Wikipedia: [website]. — URL: <https://ru.wikipedia.org/wiki/Ethanol> (access date: 2025-11-12).
  4. Isopropanol / [Electronic resource] // Wikipedia: [website]. — URL: <https://ru.wikipedia.org/wiki/Isopropanol> (access date: 2025-11-12).
  5. Tert-butyl alcohol / [Electronic resource] // Wikipedia: [website]. — URL: [https://ru.wikipedia.org/wiki/Tert-butyl alcohol](https://ru.wikipedia.org/wiki/Tert-butyl_alcohol) (access date: 2025-11-12).
  6. Cohn Walter / [Electronic resource] // Wikipedia: [website]. — URL: [https://ru.wikipedia.org/wiki/Kon, Walter](https://ru.wikipedia.org/wiki/Kon,_Walter) (access date: 2025-11-12).
  7. V. G. Tsirelson. Quantum Chemistry, Molecules, Molecular Systems, and Solids // Moscow: Binom, 2010, 422 p.
  8. Quantum Chemical Calculation of Some Trifluoromethylstyrenes Molecules by the DFT Method. Babkin V.A., Andreev D.S., Ignatov A.V., Kozhukhova A.V., Rakhimov A.I., Rakhimova N.A., Belousova V.S., Titova E.S., Denisjuk A.R., Prochukhan K. Yu. // Fluorine Notes. - 2019. No. 2 (123). R. 5-6.
  9. Granovsky A.A. Firefly version 8 [electronic resource] // Firefly computational chemistry program, 2013. URL: <https://classic.chem.msu.su/firefly/index.html> (access date: 2025-02-20).
  10. M.W.Schmidt, K.K.Baldrige, J.A.Boatz, S.T.Elbert, M.S.Gordon, J.H.Jensen, S.Koseki, N.Matsunaga, K.A.Nguyen, S.J.Su, T.L.Windus, M.Dupuis, J.A.Montgomery. "General Atomic and Molecular Electronic Structure System". Journal of Computational Chemistry, Vol. 14, 1347-1363(1993). doi:10.1002/jcc.540141112.
  11. B. M. Bode, M. S. Gordon. "MacMolPlt: A graphical user interface for GAMESS". Journal of Molecular Graphics and Modeling, Vol. 16, No. 3, 1998, pp. 133-138.
  12. Sangalov Yu. A., Babkin V. A., Minsker K. S., Nel'kinbaum Yu. Ya. Quantum-chemical studies of alcohol fragmentation in complexes with various acids. Theoretical and Experimental Chemistry. – 1983. Vol. 19. No. 5, pp. 615-620

## References

1. Shatalova N.I., Khairullina O.D., Sayfutdinova M.N. Organic chemistry. Halogen derivatives of hydrocarbons. Alcohols.

© В. А. Бабкин – акад. Российской Академии Естественных наук, акад. международной академии «Контенант», д.х.н., каф. «Математических и естественно-научных дисциплин» (МиЕНД) Себряковский филиал Волгоградского государственного технического университета (СФ ВолгГТУ), Михайловка, Волгоградская обл., Россия; Д. С. Кучеренко – студ. СФ ВолгГТУ; Д. С. Андреев – старший преподаватель кафедры МиЕНД СФ ВолгГТУ; Н. С. Минаев – ст. препод. каф. МиЕНД СФ ВолгГТУ; Р. Д. Зеренинов – студент СФ ВолгГТУ; В. С. Белоусова – д.м.н., Первый Московский государственный медицинский университет им. Н.М. Сеченова, Москва, Россия; М. И. Арцис – к.х.н., Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН, Москва, Россия, [chembio@sky.chph.ras.ru](mailto:chembio@sky.chph.ras.ru); Е. С. Титова – доц., к.х.н., кафедра «Органическая химия», Волгоградский государственный технический университет (ВолгГТУ), Волгоград, Россия; Н. А. Шрейберт – д.х.н., проф. каф. «Безопасности жизнедеятельности ИОЗ им. Н.П. Григоренко» Волгоградский государственный медицинский университет Министерства здравоохранения РФ.

© V. A. Babkin – Academician of the Russian Academy of Natural Sciences, Academician of the international Academy "Contentant", Doctor of Sciences (Chemical Sci.), Department of Mathematical and Natural Science Disciplines (MNSD), Sebyakovsky Branch of Volgograd State Technical University (SB VolgSTU), Mikhailovka, Volgograd region, Russia; D. S. Kucherenko – Student, SB VolgSTU; D. S. Andreev – Senior Lecturer the MNSD department, SB VolgSTU; N.S. Minaev – Senior Lecturer the MNSD department, SB VolgSTU; R. D. Zereninov – Student, SB VolgSTU; V.S. Belousova – Doctor of Sciences (Medical Sci.), N.M. Sechenov First Moscow State Medical University, Moscow, Russia; M. I. Artsis – PhD (Chemical Sci.), N.M. Emanuel Institute of Biochemical Physics of the Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia, [chembio@sky.chph.ras.ru](mailto:chembio@sky.chph.ras.ru); E. S. Titova – PhD (Chemical Sci.), Associate Professor, Department of Organic Chemistry (OC), Volgograd State Technical University (VolgSTU), Volgograd, Russia; N. A. Schreibert – Doctor of Sciences (Chemical Sci.), Professor at the Department of Life Safety at the N.P. Grigorenko Institute of Occupational Health, Volgograd State Medical University, Ministry of Health of the Russian Federation.

Дата поступления рукописи в редакцию – 01.02.26.

Дата принятия рукописи в печать – 15.03.26.