

**В. А. Бабкин, Д. С. Андреев, А. В. Игнатов, К. С. Мощенко, М. Н. Киселева,
А. П. Князев, Н. С. Минаев, Е. С. Титова, Е. К. Захарова, М. С. Захаров, А. И. Рахимов,
Н. А. Шрейберт, В. С. Белоусова, А.А. Москаленко, М. И. Арцис**

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ РАСЧЁТ АССОЦИАТА ДВУХ МОЛЕКУЛ ЭТИЛОВОГО СПИРТА И ТРЁХ МОЛЕКУЛ ВОДЫ МЕТОДОМ DFT

Ключевые слова: квантово-химический расчёт, метод DFT, ассоциат этилового спирта и воды, кислотная сила.

*В настоящей статье представлены результаты квантовохимических расчётов ассоциата двух молекул этилового спирта и трёх молекул воды методом DFT-PBE0/6-311g**. Для оптимизации геометрии по всем параметрам использовался градиентный метод. В процессе получения водно-спиртовых растворов происходит выделение тепла и сжатие объема раствора. Это явление называется контракцией. Величина сжатия вначале возрастает с увеличением концентрации спирта, достигает максимума при содержании его в растворе 45-48% масс., а затем снова уменьшается. Это явление объясняется гидратацией спирта, т. е. взаимодействием его с водой с образованием химических соединений. [1] Для получения оптимизированного геометрического и электронного строения, изучаемого ассоциата, две молекулы этилового спирта + три молекулы воды, то есть для определения конформера - стереоизомерной структуры, обладающий максимально отрицательной энергией, изучаемого соединения одним из авторов настоящей статьи была разработана специальная программа для расчета конфигурационных взаимодействий, входящих в состав ассоциата ингредиентов. Предварительно, был найден конформер молекулярной системы, состоящий из двух ингредиентов: спирт – спирт, затем из трех: спирт – спирт - вода и т.д. В конечном счете исследовались все возможные комбинации взаимодействия ассоциата две молекулы спирта и три молекулы воды, и был найден конформер для всех пяти компонентов для которого выполнялся расчет методом DFT. В результате получено оптимизированное геометрическое и электронное строение изучаемого ассоциата (конформера) и теоретически рассчитана кислотная сила этого соединения ($pK_a=15$, pK_a – универсальный показатель кислотности). Установлено, что этот ассоциат относится к классу слабых кислот ($pK_a>14$). Полученные данные квантово-химических расчетов могут быть использованы при объяснении явления контракции на квантовом уровне.*

**V. A. Babkin, D. S. Andreev, A. V. Ignatov, K. S. Moshchenko, M. N. Kiseleva,
A. P. Knyazev, N. S. Minaev, E. S. Titova, E. K. Zakharova, M. S. Zakharov, A. I. Rakhimov,
N. A. Schreibert, V. S. Belousova, A. A. Moskalenko, M. I. Artsis**

QUANTUM CHEMICAL CALCULATION OF THE ASSOCIATE OF TWO ETHYL ALCOHOL MOLECULES AND THREE WATER MOLECULES BY THE DFT METHOD

Keywords: quantum-chemical calculation, DFT method, ethyl alcohol and water associate, acidic strength.

*This article presents the results of quantum chemical calculations of the associate of two ethyl alcohol molecules and three water molecules using the DFT-PBE0/6-311g** method. The gradient method was used to optimize the geometry in all parameters. In the process of obtaining aqueous alcohol solutions, heat is released and the volume of the solution is compressed. This phenomenon is called a contract. The amount of compression initially increases with increasing alcohol concentration, reaches a maximum when it contains 45-48% by weight in solution, and then decreases again. This phenomenon is explained by the hydration of alcohol, i.e. its interaction with water to form chemical compounds [1]. To obtain an optimized geometric and electronic structure of the studied associate, two molecules of ethyl alcohol + three molecules of water, that is, to determine the conformer - stereoisomeric structure with the maximum negative energy of the studied compound, one of the authors of this article developed a special program for calculating the configuration interactions of the ingredients included in the associate. Previously, a conformer of the molecular system was found, consisting of two ingredients: alcohol – alcohol, then three: alcohol – alcohol - water, etc. Ultimately, all possible combinations of the interaction of the associate two alcohol molecules and three water molecules were investigated, and a conformer was found for all five components for which the DFT calculation was performed. As a result, an optimized geometric and electron structure of the studied associate (conformer) was obtained and the acidic strength of this compound was theoretically calculated ($pK_a=15$, pK_a is a universal indicator of acidity). It has been established that this associate belongs to the class of weak acids ($pK_a>14$). The obtained data from quantum chemical calculations can be used to explain the phenomenon of contraction at the quantum level.*

Введение

Несмотря на то, что система этиловый спирт – вода широко используется в настоящее время, в медицине, науке, технике и промышленности до сих пор квантовохимический расчёт этой системы и в частности ассоциата две молекулы C_2H_5OH и три молекулы H_2O методом DFT в базисе 6-311G**, который наилучшим образом учитывает корреляцию электронов [2] до настоящего времени не

выполнялся. Расчет выполнялся в рамках молекулярной модели в газовой фазе в основном состоянии. Изучалось геометрическое электронное строение десяти всевозможных комбинаций взаимодействия молекул этилового спирта(C_2H_5OH) - А и воды(H_2O) - В:

A+A+B+B+B

A+B+A+B+B

A+B+B+A+B
 A+B+B+B+A
 B+A+A+B+B
 B+A+B+A+B
 B+A+B+B+A
 B+B+A+A+B
 B+B+A+B+A
 B+B+B+A A.

спирт + спирт + спирт, затем аналогично для модели спирт + спирт + спирт + вода, и так же – для всех остальных моделей. Из 10 полученных конформеров разных комбинацией выбирался конформер, также обладающий наименьшей энергией по модулю. Последний конформер комбинации спирт + спирт + вода + вода + вода является искомым, для которого и выполнялся квантовый химический расчёт методом DFT-PBE0/6-311g**. Для реализации этой цели использовались программы [3-5].

Методическая часть

Для расчета конфигурационных взаимодействий воды и спирта одним из авторов данной научной статьи Андреевым Д. С. была разработана программа, смысл алгоритма которой заключается в следующем. Рассмотрим, например, первую комбинацию: спирт + спирт + вода + вода + вода. Сначала выполняется расчёт модели всевозможных конфигураций спирт + спирт для определения конформера (то есть конфигурации модели спирт + спирт, обладающей минимальной энергией). Далее вокруг этого конформера вращается третья молекула спирта и снова находится конформер для модели

Результаты расчетов

Оптимизированное геометрическое и электронное строение ассоциата двух молекул этилового спирта и трёх молекул воды показаны на рис. 1. и в табл.1. Используя формулу оценки универсального показателя кислотности (pKa) для метода DFT-PBE0/6-311g**: $pKa=51.048 - 150.078q_{max}^{H+}$ (где $q_{max}^{H+} = +0,24$ – максимальный заряд на атоме водорода, см. табл. 1) [6-15], находим значение кислотной силы pKa=15. Это говорит о том, что изучаемый ассоциат относится к классу очень слабых Н-кислот (pKa>14).

Таблица 1 - Оптимизированные длины связей, валентные углы и заряды изучаемого конформера

Table 1 - Optimized bond lengths, valence angles and charges of the studied conformer

Длины связей	R,Å	Валентные углы	Град	Атом	Заряды на атомах молекулы
O(1)-H(3)	1.03	H(2)-O(1)-H(3)	107	O(1)	-0.4535
O(1)-H(2)	1.00	H(14)-O(13)-H(15)	107	H(2)	0.2285
O(13)-H(14)	1.03	H(26)-O(25)-H(27)	110	H(3)	0.2356
O(13)-H(15)	1.06	H(24)-O(18)-C(17)	110	C(4)	-0.3378
O(25)-H(26)	1.03	O(18)-C(17)-H(22)	106	C(5)	-0.0254
O(25)-H(27)	0.99	O(18)-C(17)-H(23)	110	O(6)	-0.3885
O(18)-H(24)	1.02	O(18)-C(17)-C(16)	112	H(7)	0.1020
O(18)-C(17)	1.45	H(22)-C(17)-C(16)	110	H(8)	0.1057
C(17)-H(22)	1.09	H(23)-C(17)-C(16)	110	H(9)	0.1171
C(17)-H(23)	1.10	C(17)-C(16)-H(19)	110	H(10)	0.0897
C(17)-C(16)	1.53	C(17)-C(16)-H(20)	111	H(11)	0.0788
C(16)-H(19)	1.10	C(17)-C(16)-H(21)	110	H(12)	0.2341
C(16)-H(20)	1.10	H(19)-C(16)-H(20)	109	O(13)	-0.4996
C(16)-H(21)	1.10	H(19)-C(16)-H(21)	108	H(14)	0.2439
O(6)-H(12)	1.06	H(20)-C(16)-H(21)	109	H(14)	0.2360
O(6)-C(5)	1.46	H(12)-O(6)-C(5)	112	C(16)	-0.3337
C(5)-H(10)	1.09	O(6)-C(5)-H(10)	106	C(17)	-0.0222
C(5)-H(11)	1.10	O(6)-C(5)-H(11)	110	O(18)	-0.3580
C(5)-C(4)	1.53	O(6)-C(5)-C(4)	111	H(19)	0.1029
C(4)-H(7)	1.10	H(10)-C(5)-C(4)	111	H(20)	0.1062
C(4)-H(8)	1.10	H(11)-C(5)-C(4)	111	H(21)	0.1011
C(4)-H(9)	1.10	C(5)-C(4)-H(7)	110	H(22)	0.0923
		C(5)-C(4)-H(8)	111	H(23)	0.0802
		C(5)-C(4)-H(9)	109	H(24)	0.2460
		H(7)-C(4)-H(8)	108	O(25)	-0.4548
		H(7)-C(4)-H(9)	108	H(26)	0.2313
		H(8)-C(4)-H(9)	110	H(27)	0.2422

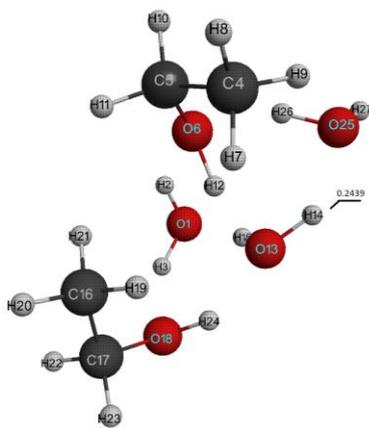


Рис. 1 - Оптимизированная атомно-молекулярная структура изучаемого конформера ($E_0 = -1406572$ кДж/моль, $E_{эл} = -2901970$ кДж/моль)

Fig. 1 – Optimized atomic-molecular structure of the studied conformer ($E_0 = -1406572$ kJ/mol, $E_{el} = -2901970$ kJ/mol)

Заключение

Таким образом, нами был впервые выполнен квантово-химический расчёт ассоциата двух молекул этилового спирта и трёх молекул воды методом DFT. Получена оптимизированная по всем параметрам атомно-молекулярная структура конформера изучаемого ассоциата. Теоретически оценена кислотная сила этого ассоциата. Показано, что он относится к классу очень слабых Бренстедовских кислот ($pK_a=15$).

Литература

1. Смешивание воды и спирта : сайт / Справочник химика 21 «Химия и химическая технология». - 2023. - URL: <https://www.chem21.info/info/66551/> (дата обращения: 16.01.2023). - Текст : электронный.
2. Цирельсон В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела. М.: Бинум, 2010, 496 с.
3. Granovsky, A.A. Firefly version 8 / A. A. Granovsky // – 2013. <http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html>.
4. General Atomic and Molecular Electronic Structure System. / M.W. Schmidt [and others] // J.Comput.Chem. – 1993. –Vol.14. – P.1347-1363. doi:10.1002/jcc.540141112.
5. Bode, B.M. MacMolPlt: A Graphical User Interface for GAMESS. / B.M. Bode, M.S. Gordon // Journal of Molecular Graphics. –1998. –№16. – P. 133-138.
6. Quantum-chemical calculation of the molecule cyclohexadiene-1,3 by the DFT method / V.A. Babkin, O.A. Moskovkin, A.V. Ignatov, D.S. Andreev. // Материалы II Всероссийской студенческой научно-технической интернет-конференции СФ ВолГТУ: тез. докл. – 2017. - С. 261-263.
7. V. A. Babkin, D. S. Andreev, A. A. Pristanskov, L. M. Lisina, A. I. Rakhimov, N. A. Rakhimova, V. S. Belousova and G. E. Zaikov. The Relationship between the Antimicrobial Properties of Benzylpenicillin and the Quantum Chemical Parameters of Its Structure (The DFT Method) . American Chemical Science Journal.V. 11,N3, 2016.pp.1-7.
8. V.A. Babkin, O.A. Moskovkin, D.S. Andreev, A.V. Ignatov. Quantum-chemical calculation of the molecule 6,6-dimethylfulvene by the DFT method. В конф.: Инновационное развитие строительства Волгоградской

области: Материалы II Всероссийской студенческой научно-технической Интернет-конференции Себряковского филиала ВолГТУ и ИАиС ВолГТУ 22 сентября 2017 г., Михайловка-Волгоград. Волгоград: ВолГУ, с. 259-261.

9. V.A. Babkin, O.A. Moskovkin, D.S. Andreev, A.V. Ignatov. Quantum-chemical calculation of the molecule cyclohexadiene-1,3 by the DFT method. В конф.: Инновационное развитие строительства Волгоградской области: Материалы II Всероссийской студенческой научно-технической Интернет-конференции Себряковского филиала ВолГТУ и ИАиС ВолГТУ 22 сентября 2017 г., Михайловка-Волгоград. Волгоград: ВолГУ, с. 261-263.
10. 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., К.Ю. Прочухан. Квантово-химический расчёт некоторых молекул трифторметилстиролов методом DFT. // Fluorine Notes, 2019, № 123, с. 5-6.
11. Babkin V.A., Andreev D.S., Ignatov A.V., Belousova V.S. Quantum-chemical calculation of α -cyclopropyl-isopropylstyrene molecule by the DFT method. В сборнике: Материалы II Всероссийской научно-практической конференции Себряковского филиала ФГБОУ ВО "Волгоградский государственный технический университет". Редколлегия: С.Е. Карпушова (отв. ред.) [и др.]. Волгоград, 2020. С. 48-51.
12. В.А. Бабкин, Д. С. Андреев, Ю.А. Вашута, А.В. Кожухова, В.С. Белоусова, Е.С. Титова, А.Р. Титова, А.И. Рахимов, Р.О. Болдырев, М.И. Арцис, Г.Е. Заиков. Квантово-химический расчёт противовирусного препарата дексаметазон методами MNDO, AB INITIO и DFT // Журнал "Фторные заметки". Выпуск № 6(133), ноябрь - декабрь 2020.
13. Бабкин В.А., Андреев Д. С., Игнатов А. В., Болдырев Р. О., Борисов Д. А., Захаров Д. С., Титова Е. С., Белоусова В. С., Рахимов А. И., Фомичев В. Т. Расчет электронной структуры некоторых органических оксидов методом DFT // Известия ВолГТУ. Серия "Химия и технология элементоорганических мономеров и полимерных материалов". - 2020. - № 12 (247). - С. 32-34.
14. Бабкин В.А., Андреев Д. С., Игнатов А. В., Борисов Д. А., Болдырев Р. О., Крапчетова Т. В., Решетникова М. В., Киселева М. Н., Титова Е. С., Рахимов А. И., Белоусова В. С. Расчет электронной структуры мономеров катионной полимеризации, разветвленных в β -положении по отношению к двойной связи, методом DFT // Известия ВолГТУ. Серия "Химия и технология элементоорганических мономеров и полимерных материалов". - 2020. - № 12 (247). - С. 35-38.
15. V.A. Babkin, D.S. Andreev, A.V. Ignatov, Yu.A. Vashuta, A.V. Kozhukhova, R.O. Boldyrev, N.S. Minaev, M.N. Kiseleva, E.S. Titova, A.I. Rakhimov, V.S. Belousova, A.A. Moskalenko, M.I. Arcis. Quatum - chemical calculation of tetracycline by the methods MNDO, DFT and ab initio. Иновационный потенциал развития науки в современном мире: достижения и инновации/ Сборник научных статей по материалам XV Международной конференции (4 октября 2024 г., г. Уфа). - 2024. - С.6-10.

References

1. Mixing water and alcohol : website / Chemist's Handbook 21 "Chemistry and Chemical Technology". - 2023. - URL: <https://www.chem21.info/info/66551/> (date of access: 2023-01-16). - Text : electronic.
2. Tsirelson V.G. Quantum Chemistry. Molecules, Molecular Systems and Solids. Moscow: Binom, 2010, 496 p.

3. Granovsky, A.A. Firefly version 8 / A. A. Granovsky // – 2013. <http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html>.
4. General Atomic and Molecular Electronic Structure System. / M.W. Schmidt [and others] // J.Comput.Chem. – 1993. –Vol.14. – P.1347-1363. doi:10.1002/jcc.540141112.
5. Bode, B.M. MacMolPlt: A Graphical User Interface for GAMESS. / B.M. Bode, M.S. Gordon // Journal of Molecular Graphics. –1998. –№16. – P. 133-138.
6. Quantum-chemical calculation of the molecule cyclohexadiene-1,3 by the DFT method / V.A. Babkin, O.A. Moskovkin, A.V. Ignatov, D.S. Andreev. // Materials of the II All-Russian Student Scientific and Technical Internet Conference of SB VSTU. – 2017. - pp. 261-263.
7. V. A. Babkin, D. S. Andreev, A. A. Pristanskov, L. M. Lisina, A. I. Rakhimov, N. A. Rakhimova, V. S. Belousova and G. E. Zaikov. The Relationship between the Antimicrobial Properties of Benzylpenicillin and the Quantum Chemical Parameters of Its Structure (The DFT Method) . American Chemical Science Journal.V. 11,N3, 2016.pp.1-7.
8. V.A. Babkin, O.A. Moskovkin, D.S. Andreev, A.V. Ignatov. Quantum-chemical calculation of the molecule 6,6-dimethylfulvene by the DFT method. In the conference: Innovative development of construction in the Volgograd region: Proceedings of the II All-Russian Student Scientific and Technical Internet Conference of the Sebyrak branch of VolgSTU and the IAiS of VolgSTU on September 22, 2017, Mikhaylovka-Volgograd. Volgograd: Volga State University, pp. 259-261.
9. V.A. Babkin, O.A. Moskovkin, D.S. Andreev, A.V. Ignatov. Quantum-chemical calculation of the molecule cyclohexadiene-1,3 by the DFT method. In the conference: Innovative development of construction in the Volgograd region: Proceedings of the II All-Russian Student Scientific and Technical Internet Conference of the Sebyrak branch of VolgSTU and the IAiS of VolgSTU on September 22, 2017, Mikhaylovka-Volgograd. Volgograd: Volga State University, pp. 261-263.
10. 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., K.Yu. Prochukhan. Quantum chemical calculation of some trifluoromethyl styrene molecules by DFT method. // Fluorine Notes, 2019, No. 123, pp. 5-6.
11. Babkin V.A., Andreev D.S., Ignatov A.V., Belousova V.S. Quantum-chemical calculation of α -cyclopropyl-p-isopropylstyrene molecule by the DFT method. In the collection: Materials of the II All-Russian Scientific and Practical Conference of the Sebyrak Branch of the Volgograd State Technical University. Editorial board: S.E. Karpushova (editor-in-chief) [and others]. Volgograd, 2020. pp. 48-51.
12. V.A. Babkin, D. S. Andreev, Yu.A. Vashuta, A.V. Kozhukhova, V.S. Belousova, E.S. Titova, A.R. Titova, A.I. Rakhimov, R.O. Boldyrev, M.I. Artsis, G.E. Zaikov. Quantum chemical calculation of the antiviral drug dexamethasone by MNDO, AB INITIO and DFT methods // Journal "Fluorine Notes". Issue No. 6(133), November - December 2020.
13. Babkin V.A., Andreev D. S., Ignatov A.V., Boldyrev R. O., Borisov D. A., Zakharov D. S., Titova E. S., Belousova V. S., Rakhimov A. I., Fomichev V. T. Calculation of the electronic structure of some organic oxides by the DFT method // Izvestia of VolgSTU. The series "Chemistry and technology of organoelement monomers and polymeric materials". - 2020. - № 12 (247). - pp. 32-34.
14. Babkin V.A., Andreev D. S., Ignatov A.V., Borisov D. A., Boldyrev R. O., Krapchetova T. V., Reshetnikova M. V., Kiseleva M. N., Titova E. S., Rakhimov A. I., Belousova V. S. Calculation of the electronic structure of cationic polymerization monomers branched in the β position with respect to to a double bond, using the DFT method // Izvestia of VolgSTU. The series "Chemistry and technology of organoelement monomers and polymeric materials". - 2020. - № 12 (247). - pp. 35-38.
15. V.A. Babkin, D.S. Andreev, A.V. Ignatov, Yu.A. Vashuta, A.V. Kozhukhova, R.O. Boldyrev, N.S. Minaev, M.N. Kiseleva, E.S. Titova, A.I. Rakhimov, V.S. Belousova, A.A. Moskalenko, M.I. Arcis. Quantum - chemical calculation of tetracycline by the methods MNDO, DFT and ab initio. Innovative potential of science development in the modern world: achievements and innovations/ Collection of scientific articles based on the XV International Conference (October 4, 2024, Ufa). - 2024. - pp.6-10.

© **В. А. Бабкин** – академик Российской Академии Естественных наук, академик международной академии «Контенант», д.х.н., кафедры «Математических и естественно-научных дисциплин» (МИЕНД) Себряковский филиал Волгоградского государственного технического университета (СФ ВолГТУ), Михайловка, Волгоградская обл., Россия; **Д. С. Андреев** – старший преподаватель кафедры МИЕНД СФ ВолГТУ; **А. В. Игнатов** – лаборант – исследователь, кафедра МИЕНД СФ ВолГТУ; **К. С. Мощенко** – студент СФ ВолГТУ; **М. Н. Киселева** – старший преподаватель кафедры МИЕНД СФ ВолГТУ; **А. П. Князев** – доцент, к.г.н., зав. каф. «Технические дисциплины и теплоэнергетика», СФ ВолГТУ; **Н. С. Минаев** – старший преподаватель кафедры МИЕНД СФ ВолГТУ; **Е.С. Титова** – доц., к.х.н., кафедра «Органическая химия», Волгоградский государственный технический университет (ВолГТУ), Волгоград, Россия; **Е. К. Захарова** – доц., к.х.н., кафедра «Органическая химия», ВолГТУ; **М.С. Захаров** – студент, СФ ВолГТУ; **А. И. Ракимов** – академик РАЕН, д.х.н., профессор кафедры «Органическая химия», ВолГТУ; **Н. А. Шрейбер** – д.х.н., профессор, и.о. директора, Институт химических проблем экологии академии естественных наук РФ, Волгоград, Россия; **В. С. Белоусова** – д.м.н., Первый Московский государственный медицинский университет им. Н.М. Сеченова, Москва, Россия; **А. А. Москаленко** – студент, Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск, Россия; **М. И. Арцис** – к.х.н., Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН, Москва, Россия, chembio@sky.chph.ras.ru.

© **V. A. Babkin** – Academician of the RAE, Academician of the international Academy "Contentant", Doctor of Sciences (Chemical Sci.), Department of Mathematical and Natural Science Disciplines (MNSD), Sebyrakovsky Branch of Volgograd State Technical University (SB VolgSTU), Mikhaylovka, Volgograd region, Russia; **D. S. Andreev** – Senior Lecturer of the MNSD department, SB VolgSTU; **A. V. Ignatov** – Laboratory Assistant Researcher, the MNSD department, SB VolgSTU; **K. S. Moshchenko** – Student, SB VolgSTU; **M. N. Kiseleva** – Senior Lecturer, the MNSD department, SB VolgSTU; **A. P. Knyazev** – Associate Professor, PhD (Geological Sci.), Professor, Head of the Department of Technical Disciplines and Thermal Power Engineering, SB VolgSTU; **N.S. Minaev** – Senior Lecturer the MNSD department, SB VolgSTU; **E. S. Titova** – Associate Professor, PhD (Chemical Sci.), Department of Organic Chemistry (OC), Volgograd State Technical University (VolgSTU), Volgograd, Russia; **E. K. Zakharova** – Associate Professor, Candidate of Chemical Sciences, the OC department, VolgSTU; **M. S. Zakharov** – Student, SB VolgSTU; **A. I. Rakhimov** – Academician of the Russian Academy of Natural Sciences, Doctor of Sciences (Chemical Sci.), Professor of the OC department, VolgSTU; **N.A. Schreiber** – Doctor of Sciences (Chemical Sci.), Professor, Acting Director of the Institute of Chemical Problems of Ecology of the Academy of Natural Sciences of Russian Federation, Volgograd, Russia; **V.S. Belousova** – Doctor of Sciences (Medical Sci.), N.M. Sechenov First Moscow State Medical University, Moscow, Russia; **A. A. Moskalenko** – Student, National Research Tomsk Polytechnic University, Tomsk, Russia; **M. I. Artsis** – PhD (Chemical Sci.), N.M. Emanuel Institute of Biochemical Physics of the Russian Academy of Sciences, chembio@sky.chph.ras.ru