

**МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ РЕСПУБЛИКИ БЕЛАРУСЬ**

**Учреждение образования**

**«Международный государственный экологический институт  
имени А.Д. Сахарова»**

**Белорусского государственного университета**

**ФАКУЛЬТЕТ ЭКОЛОГИЧЕСКОЙ МЕДИЦИНЫ**

**КАФЕДРА ЭКОЛОГИЧЕСКОЙ ХИМИИ И БИОХИМИИ**

**ФУРАНОКУМАРИНЫ. ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА И  
ИХ ПРИМЕНЕНИЕ В ФАРМАЦЕВТИЧЕСКОЙ И ЭКОЛОГИЧЕСКОЙ  
ПРОМЫШЛЕННОСТИ**

**Дипломная работа**

**Специальность 1-33 01 05 Медико-биологическое дело**

**Исполнитель:**

студентка 5 курса 52063 группы

дневной формы обучения \_\_\_\_\_ Мурашко М.С.

**Научный руководитель:**

к.х.н., доцент, профессор РАЕ \_\_\_\_\_ Шахаб С. Н.

**К защите допущена:**

заведующий кафедрой

экологической химии и биохимии:

к.х.н., доцент, профессор РАЕ \_\_\_\_\_ Шахаб С. Н.

МИНСК 2020

## РЕФЕРАТ

**Дипломная работа:** изучение физико-химических свойств фуранокумаринов и их применения в фармацевтической и экологической промышленности: 53 страницы, 22 рисунка, 7 таблиц, 28 источников.

**Ключевые слова:** фуранокумарины, борщевик Сосновского, кванто-химическое моделирование.

**Объект исследования:** фуранокумарины.

**Цель работы:** изучение физико-химических свойств фуранокумаринов.

Для достижения поставленной цели необходимо решить следующие задачи:

- 1) Анализ литературных данных по данной теме.
- 2) Расчет равновесных геометрических и термодинамических параметров фуранокумаринов полуэмпирическим (PM6) и неэмпирическим методами квантовой химии (B3LYP/6-311+G\*).
- 3) Квантово-химический расчет комплексов между фуранокумаринами и молекулами CO и CO<sub>2</sub> в среде растворителя воды.

**Полученные данные свидетельствуют:** о том, что между молекулами CO и CO<sub>2</sub> и фуранокумаринами могут образовываться устойчивые комплексы, которые являются сильными поглотителями загрязнителей воздуха.

**Область применения:** Образование, экология, химия.

## РЭФЕРАТ

**Дыпломная работа:** вывучэнне фізіка хімічных уласцівасцяў фуранокумарынаў і іх прымянення ў фармацэўтычнай і экалагічнай прамысловасці: 53 старонкі, 22 малюнка, 7 табліц, 28 крыніц.

**Ключавыя словы:** фуранокумарыны, баршчэўнік Сасноўскага, квантавая-хімічны мадэляванне.

**Аб'ект даследавання:** фуранакумарыны.

**Мэта работы:** даследаванне фізіка-хімічных уласцівасцяў фуранакумарынаў.

Для дасягнення пастаўленай мэты неабходна вырашыць наступныя **задачы:**

- 1) Аналіз літаратурных даных па дадзенай тэме.
- 2) Разлік раўнаважкіх геаметрычных параметраў фуранакумарынаў неэмпірычным метадам квантавай хіміі B3LYP/6-311+G\*.
- 3) Квантава-хімічны разлік комплексаў паміж фуранакумарынамі і малекуламі CO і CO<sub>2</sub> у асяроддзі растваральніка вады.

**Атрыманне дадзеныя сведчаць:** пра тое, што паміж малекуламі CO і CO<sub>2</sub> і фуранакумарынамі могуць утварацца ўстойлівыя комплексы, якія з'яўляюцца выдатнымі паглынальнікамі забруджанага паветра.

**Вобласць ужывання:** адукацыя, экалогія, хімія.

## ABSTRACT

**Thesis:** study of physico-chemical properties of furanocoumarins and their application in the pharmaceutical and environmental industries: 53 pages, 22 pictures, 7 table, 28 sources.

**Key words:** furanocoumarins, borschevik Sosnovsky, quantum-chemical modeling.

**Object of study:** furanocoumarins.

**Objective:** to study the physico-chemical properties of furanocoumarins.

To achieve this goal, it is necessary to solve the following **tasks**:

- 1) Analysis of literature data on this topic.
- 2) Calculation of the equilibrium geometric parameters of furanocoumarins by the nonempirical method of quantum chemistry B3LYP/6-311+G\*.
- 3) Quantum-chemical calculation of the complexes between furanocoumarins and CO and CO<sub>2</sub> molecules in a water solvent medium.

**Obtaining evidence suggests** that stable complexes can form between CO and CO<sub>2</sub> molecules and furanocoumarins, which are excellent absorbers of polluted air.

**Scope:** education, ecology, chemistry.