



Рисунок 2 – Объем производства табачных изделий, млн. шт. сигарет

#### ЛИТЕРАТУРА

1. «Гродненская табачная фабрика «Неман». [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.tabak.by/> – Дата доступа: 13.02.2020.
2. Корректировка акта инвентаризации выбросов загрязняющих веществ в атмосферный воздух / ОАО «Гродненская табачная фабрика «Неман». – 2017.
3. Экологический паспорт предприятия ОАО «Гродненская табачная фабрика «Неман» Концерн «Белгоспищепром».

## ФИЗИЧЕСКАЯ СОРБЦИЯ МЕЖДУ CO, CO<sub>2</sub> И ФУРАНОКУМАРИНАМИ PHYSICAL SORPTION BETWEEN CO, CO<sub>2</sub> AND FURANOCUMARINES

**В. С. Чепля, Е. С. Лукша, С. Н. Шахб**  
**V. Cheplya, E. Luksha, S. Shahab**

*Белорусский государственный университет, МГЭИ им. А. Д. Сахарова БГУ,  
г. Минск, Республика Беларусь  
vlad1997.cheplya@gmail.com  
Belarusian State University, ISEI BSU,  
Minsk, Republic of Belarus*

В настоящей работе исследованы адсорбционные свойства производных фуранокумаринов при несвязанном взаимодействии с CO и CO<sub>2</sub> с помощью теории функционала плотности (уровни теории DFT: B3LYP/6-31+G\* и M06-2X/6-31+G\*) в воде растворителе. Определено несвязанное взаимодействие названных соединений с CO и CO<sub>2</sub> по электронным свойствам, таким как E<sub>НОМО</sub>, E<sub>ЛУМО</sub>, энергетический зазор между LUMO и НОМО, глобальная твердость.

In the present work, the adsorption properties of furanocoumarin derivatives at the nonbonded interaction with CO and CO<sub>2</sub> are investigated using the density functional theory (DFT: B3LYP/6-31+G\* and M06-2X/6-31+G\* levels of theory) in the solvent water. The nonbonded interaction of the named compounds with CO and CO<sub>2</sub> by electronic properties such as E<sub>НОМО</sub>, E<sub>ЛУМО</sub>, the energy gap between LUMO and НОМО, global hardness was determined.

*Ключевые слова:* фуранокумарины, теория функционала плотности, несвязанное взаимодействие.

*Keywords:* furanocoumarins, theory of density functional, unbound interaction.

<https://doi.org/10.46646/SAKH-2020-2-442-444>

Биологические свойства фуранокумаринов являются целью исследований в фармацевтической промышленности, поэтому значительный интерес был проявлен к их доступности и источникам. Многие фуранокумарины токсичны и вырабатываются растениями как защитный механизм против различных видов хищников, начиная от насекомых и заканчивая млекопитающими. Данные соединения уже давно известны своей биологической активностью, воздействуя на несколько систем организма, в частности на ферменты P450. Известно также, что фуранокумарины вызывают фоточувствительность кожи, свойство, которое может быть использовано для усиления ультрафиолетового лечения кожных заболеваний, таких как псориаз и витилиго [3].

Молекулярное моделирование включает в себя теоретические методы, которые могут быть использованы в качестве эффективных инструментов, позволяющих лучше понять электронные, спектральные, а также структурные модели поведения, позволяющие прогнозировать и интерпретировать характеристики возбужденного состояния различных видов молекул. В частности, теория функционала плотности (DFT) – это квантово-механический метод, позволяющий точно объяснить структуру, энергетические и молекулярные характеристики соединений [1,4,5]. Целью настоящей работы является изучение фуранокумариновых веществ для дальнейшего пользования в поисках решения экологических проблем CO и CO<sub>2</sub> в мире.

В настоящем исследовании квантово-химические расчеты были проведены для оптимизации двух производных фуранокумаринов (соединения I и II) и таких комплексов, как изомер I / CO, изомер I / CO<sub>2</sub>, изомер II / CO, изомер II / CO<sub>2</sub> с использованием метода DFT (B3LYP и M06-2X) в базисе 6-311+G\*, установленным программным обеспечением Gaussian 09W [2]. Энергию адсорбции (E<sub>ad</sub>) исследуемых систем рассчитывали по следующим уравнениям:

$$E_{ad} = E_{\text{isomer I/CO}} - [E_{\text{isomer I}} + E_{\text{CO}}] \quad (1)$$

$$E_{ad} = E_{\text{isomer I/CO}_2} - [E_{\text{isomer I}} + E_{\text{CO}_2}] \quad (2)$$

$$E_{ad} = E_{\text{isomer II/CO}} - [E_{\text{isomer II}} + E_{\text{CO}}] \quad (3)$$

$$E_{ad} = E_{\text{isomer II/CO}_2} - [E_{\text{isomer II}} + E_{\text{CO}_2}] \quad (4)$$

Были рассчитаны электронные свойства названных соединений, энергия разрыва между НОМО и LUMO, потенциал ионизации, сродство к электрону, электроотрицательность, электронный химический потенциал, электрофильность, природные заряды и дипольный момент. Оптимизированные молекулярные структуры, поверхности НОМО и LUMO визуализировались с помощью программного обеспечения GaussView 06.

Несвязанное взаимодействие CO и CO<sub>2</sub> с соединениями I и II исследовали с помощью расчетов DFT в воде-растворителе. Оптимизированные структуры соединений: изомер I, изомер II, комплексный изомер (I) / CO, комплексный изомер (I) / CO<sub>2</sub>, комплексный изомер(II) / CO и комплексный изомер (II) / CO<sub>2</sub> показаны на рисунке.

Были рассмотрены различные состояния взаимодействия соединений I и II с CO и CO<sub>2</sub>. На первом этапе все состояния были рассчитаны методом РМ6. По рассчитанным энергиям мы выбрали наиболее стабильное состояние для соединений I и II с CO и CO<sub>2</sub> с наименьшей энергетической ценностью.

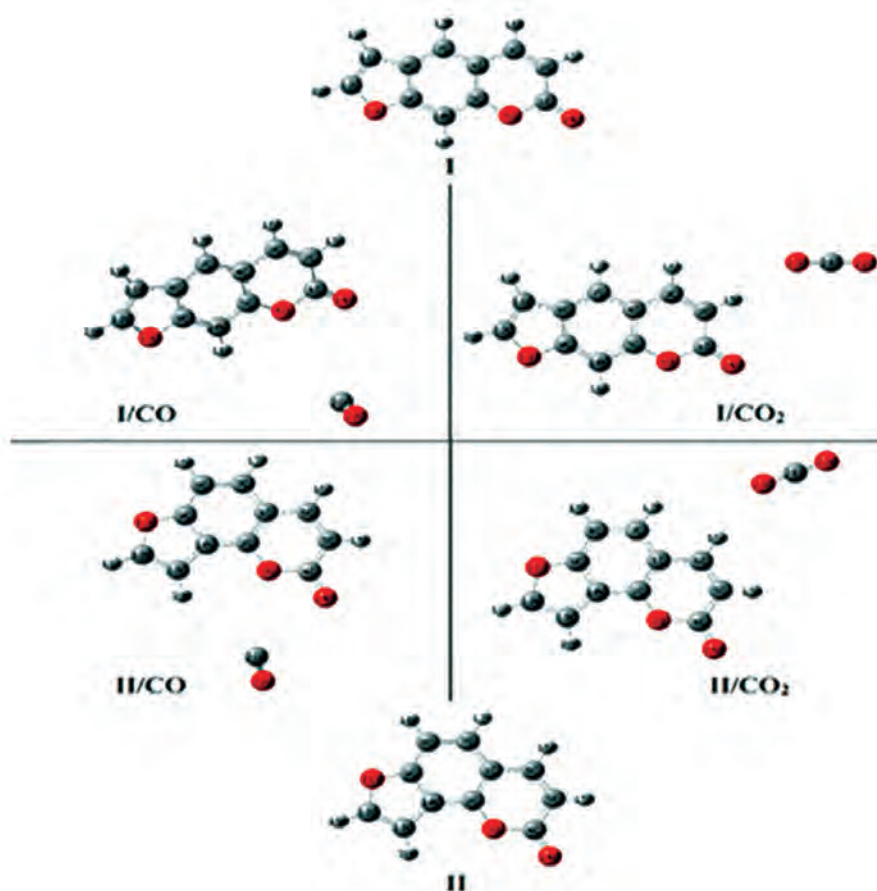


Рисунок 1 – Оптимизированные структуры соединений I, II и комплексов I/CO, I/CO<sub>2</sub>, II/CO, II/CO<sub>2</sub> с использованием B3LYP/6-311+G\* уровня теории

Таблица – Термохимические параметры взаимодействия соединений I и II с CO и CO<sub>2</sub> оптимизированы методом B3LYP/6-311+G\*.

| Compound           | E+G(kcal/mol) | E+H (kcal/mol) | E+T (kcal/mol) | S (cal/mol.K) |
|--------------------|---------------|----------------|----------------|---------------|
| I                  | -406947.428   | -406918.809    | -406919.401    | 95.980        |
| I/CO               | -478080.495   | -478041.354    | -478041.946    | 131.280       |
| I/CO <sub>2</sub>  | -525328.950   | -525288.038    | -525288.631    | 137.218       |
| II                 | -406948.046   | -406919.474    | -406902.066    | 95.830        |
| II/CO              | -478083.046   | -478041.440    | -478042.032    | 141.351       |
| II/CO <sub>2</sub> | -525329.828   | -525288.678    | -525289.270    | 138.019       |

Далее произведен анализ взаимодействия между CO и CO<sub>2</sub> и соединениями I и II и оптимизация с использованием уровня теории B3LYP/6-311G\*. Оптимизированные структуры комплексов I / CO, I / CO<sub>2</sub>, II / CO и II / CO<sub>2</sub> показаны на рисунке. В таблице приведены термохимические параметры, такие как сумма электронной и тепловой энергий (E+T), сумма электронной и тепловой энтальпий (E+H), сумма электронной и тепловой свободных энергий (E+G) и Энтропия оптимизированных соединений и комплексов с использованием уровня теории B3LYP/6-311+G\*. Когда соединения I и II находятся в несвязанном взаимодействии с CO и CO<sub>2</sub>, значения энергии Гиббса и энтальпии уменьшаются. Энергетические значения отражают снижение реакционной способности и повышение стабильности молекул I и II в присутствующих CO и CO<sub>2</sub>.

В результате вычислений выявлено, что энергия адсорбции ( $E_{ad}$ ) CO над соединением I имеет положительное значение около 0,0000187 эВ; следовательно, взаимодействие является эндотермическим, тогда как энергия адсорбции CO<sub>2</sub> над соединением I имеет отрицательное значение около -0,0001689 эВ, что свидетельствует о экзотермичности взаимодействия. Кроме того, энергии адсорбции CO и CO<sub>2</sub> над соединением II имеют отрицательное значение около -0.000017 эВ и -0.000137 эВ соответственно; следовательно, взаимодействие является экзотермическим.

Анализ теорией молекулярных орбиталей демонстрирует, что орбитали НОМО и LUMO соединения I и комплексов I / CO, I / CO<sub>2</sub> в основном сосредоточены на двойных связях (-C=C-) бензола, альфа-пирона, фурановых колец и атомов кислорода. НОМО орбитали комплекса II и комплексов II/CO, II/CO<sub>2</sub> в основном локализируются на двойных связях (-C=C-) в бензоле, альфа-пироне, фурановых кольцах и атомах кислорода, в то время как LUMO орбитали фокусируются на двойных связях (-C=C-) бензола, альфа-пиронного кольца и атомах кислорода в альфа-пироновом кольце. Таким образом, перенос заряда от НОМО к LUMO в соединениях I, II и комплексах I / CO, I / CO<sub>2</sub>, II / CO, II / CO<sub>2</sub> обусловлен вкладом связей  $\pi$  и одиночных пар атомов кислорода.

Энергетические зазоры между LUMO и НОМО ( $E_g$ ) соединений I, II составляют соответственно 4,26 эВ и 4,40 эВ, и после взаимодействия с CO и CO<sub>2</sub> эти значения не изменились.

В настоящей работе изучено несвязывающее взаимодействие производных фуранокумаринов (I и II) и CO и CO<sub>2</sub> на уровне теории B3LYP/6-311+G\*. Установлено, что электронные свойства соединений I и II чувствительны к адсорбции CO и CO<sub>2</sub>. Замечено изменение атомных зарядов несвязывающим взаимодействием CO и CO<sub>2</sub> у названных соединений. Было установлено, что  $\lambda_{max}$  соединения I и II при несвязанном взаимодействии с CO и CO<sub>2</sub> не изменяется. По результатам работы тензоров химического сдвига было описано несвязанное взаимодействие рассматриваемых соединений с CO и CO<sub>2</sub>, которое приводит к анизотропному и изотропному химическому сдвигу. Расчетные результаты показали несвязанное взаимодействие между производными фуранокумаринов и CO и CO<sub>2</sub>. Таким образом, фуранокумарины могут быть использованы для решения экологических проблем, связанных с выбросами CO и CO<sub>2</sub> во всем мире.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Бутырская, Е. В. Компьютерная химия: Основы теории и работа с программами GAUSSIAN и GAUSSVIEW // Солон-пресс. – 2011. – 224 с.
2. Соловьев, М. Е. Компьютерная химия / М. Е. Соловьев// СОЛОН-Пресс. – 2005. – 536 с.
3. Jurecka, P. Density Functional Theory Augmented with an Empirical Dispersion Term: Interaction Energies and Geometries of 80 Noncovalent Complexes Compared with ab initio Quantum Mechanics Calculations// J. Comput. Chem. – 2007. – P. 555–569.
4. Litwinienko, G. Abnormal Solvent Effects on Hydrogen Atom ion // The Journal of Organic Chemistry-2005.
5. Shahab, S. Polarization, excited states, trans-cis properties and anisotropy of thermal and electrical conductivity of the 4-(phenyldiazonyl)aniline in PVA matrix //S. Shahab, L. Filippovich, M. Sheikhi, R. Kumar, E. Dikumar, H. Yahyaei, A. Muravsky, J. Mol. Struct. 1141 (2017). – P. 703–709.