

Отметим, что наименьшей изменчивостью отличаются тангенциальные размеры ранних и поздних трахеид (коэффициент вариации составил для ранних трахеид 3,4 %, для поздних – 3,7 %), а потому в ряде исследований данные параметры вообще не учитывают [3].

Таким образом, в результате проведенных исследований получены новые экспериментальные данные и выявлена закономерная изменчивость морфолого-анатомической структуры годичных слоев сосны обыкновенной в сосняке долгомошном и сосняке багульниковом. Показана значимость отдельных размерных характеристик для установления типа леса. Установлено, что к наиболее изменчивым морфолого-анатомическим параметрам можно отнести количество поздних трахеид (10%) и площадь клеточной стенки поздних трахеид (9%), а также площадь клеточной стенки ранних трахеид (6%). При этом следует отметить, что все морфолого-анатомические параметры годичных слоев у сосняка долгомошного выше, чем у сосняка багульникового (за исключением количества ранних трахеид), что может быть обусловлено лучшими условиями местопроизрастания.

В целом авторы полагают, что уникальность морфолого-анатомических параметров годичных слоев древесины сосны обыкновенной наряду с относительной простотой их фиксации открывают широкие возможности не только для диагностики происхождения лесоматериалов, но и для изучения широкого спектра климатических и экологических изменений в прошлом.

ЛИТЕРАТУРА

1. Унжакова, С. В. Технология работы по идентификации места происхождения древесины на основе дендрохронологической информации / С.В. Унжакова, Ю.М. Жаворонков //Криминалистика: вчера, сегодня, завтра. – 2017. – №. 3 (3). – С. 83–86.
2. Björklund, J. Dendroclimatic potential of dendroanatomy in temperature-sensitive *Pinus sylvestris* / Björklund J [et al.] // Dendrochronologia. – 2020. – V. 60. – P. 1–9. DOI: 10.1016/j.dendro.2020.125673
3. Lee, LC. Partial least squares-discriminant analysis (PLS-DA) for classification of high-dimensional (HD) data: a review of contemporary practice strategies and knowledge gaps /. Lee LC, Liang CY, Jemain AA //Analyst. – 2018. – V. 143. – №. 15. – P. 3526–3539. DOI: 10.1039/c8an00599k

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ СОРЕБЦИОННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ МЕЖДУ ПСОРАЛЕНОМ И ОКСИДОМ УГЛЕРОДА (II) QUANTUM CHEMICAL ANALYSIS OF THE SORPTION INTERACTION BETWEEN PSORALENE AND CARBON DIOXIDE (II)

В. С. Чепля, С. Н. Шахаб
V. Cheplya, 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 псоралена при взаимодействии с СО с помощью теории функционала плотности (уровень теории DFT: wB97XD/6-31G*) в воде как растворителе. Определено несвязанное взаимодействие псоралена и СО по электронным свойствам, таким как E_{HOMO} и E_{LUMO} , энергетический зазор между HOMO и LUMO, глобальная твердость.

In this paper, the adsorption properties of psoralen in the interaction with CO with the help of the density functional theory (DFT theory level: wB97XD/6-31G*) in a water solvent are investigated. Definitely unrelated interaction of psoralen and CO by electronic properties such as ENOMO and ELUMO, energy gap between HOMO and LUMO, global hardness.

Ключевые слова: псорален, адсорбция, DFT.

Keywords: psoralen, adsorption, DFT.

<https://doi.org/10.46646/SAKH-2021-1-358-360>

Проблема загрязнения окружающего воздуха является одной из приоритетных проблем современной науки, а поиск инновационных способов его очистки одним из главных ее направлений. Использование методов компьютерной химии для изучения физико-химических, адсорбционных свойств молекул, по сравнению

с экспериментальными исследованиями, значительно ускоряет получение теоретических результатов. В частности, в создании модели сильных поглотителей СО воздуха с помощью методов квантовой химии.

Оценочное квантово-химическое моделирование комплексов между псораленом и СО произведено полуэмпирическим методом РМ6. По рассчитанным значениям энергий выбраны наиболее стабильные комплексы [1].

Полное квантово-химическое моделирование комплексов псоралена с СО проведено с помощью метода wB97XD/6-31G*. Оптимизированные структуры соединения показана на рисунке 1. Оптимизированные структуры соединений: псорален, комплекс псорален/СО (I) показаны на рисунке 1.

В таблице 1 приведены термодинамические 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 (S) оптимизированных соединений и комплексов [1, 3].

Данные таблицы 1 свидетельствуют о том, что, когда молекула псоралена находится в несвязанном состоянии, значения E+G, E+H и E+T больше, чем в связанном. Уменьшение значения энергии отражает снижение реакционной способности и повышение стабильности молекулы псоралена в присутствии СО.



Рис. 1 – Структурные формулы: а) псорален; б) комплекс псорален/СО

Таблица 1 – Термодинамические параметры псоралена и комплексов псорален с СО и СО₂, рассчитанные с помощью метода wB97XD/6-31G*

Соединение	E+G (ккал/моль)	E+H (ккал/моль)	E+T (ккал/моль)	S (кал/моль*К)
Псорален	-408 763.807	-408 674.740	-408 681.127	96.645
Псорален/СО	-486 681.725	-486 779.533	-487 749.835	108.948

Электронные спектры для комплексов псорален/СО для одноэлектронных возбуждений в области 223,70–478,67 нм. (табл. 2).

Таблица 2 – Электронная структура комплексов в воде, рассчитанная методом wB97XD/6-31G* относительно основных пиков

Псорален/СО			
Состояние	Длина волны, нм	Разложение волновых функций по однократно возбужденной конфигурации	Сила осциллятора (f)
$S_0 \rightarrow S_4$	337.9	- 0.3 (35→40) + 0.2 (36→43) - 0.5 (39→40)	0.49
$S_0 \rightarrow S_{11}$	290.6	+ 0.5 (36→40) + 0.2 (36→41) + 0.2 (38→40) - 0.2 (38→41) - 0.2 (39→42) + 0.1 (39→43)	0.29
$S_0 \rightarrow S_{12}$	270.3	+ 0.2 (36→44) - 0.2 (38→44) - 0.6 (39→44) - 0.1 (39→46)	0.24

Из рисунка 2 видно, что первая широкая и интенсивная полоса поглощения с максимумом при 337.9 нм с $f = 0.4850$ относится к переходу в первое возбужденное синглетное состояние молекулы ($S_0 \rightarrow S_4$). Расчеты показывают, что данное возбужденное состояние описывается волновой функцией, отвечающей наложению трех конфигураций для одноэлектронных возбуждений 35→40, 36→43, 39→40. Возбуждение электрона с 36 молекулярной орбитали на нижнюю вакантную молекулярную орбиталь 43 дает главный вклад в полосу поглощения при 337.9 нм.

Вторая полоса поглощения наблюдается при 290.6 нм с $f = 0.2864$ и относится к переходу в возбужденное синглетное состояние молекулы ($S_0 \rightarrow S_{11}$). Расчеты показывают, что данное возбужденное состояние описывается волновой функцией, отвечающей наложению шести конфигураций для одноэлектронных возбуждений (таблица 2, рисунок 2). Возбуждение электрона с (36→40) дает главный вклад в полосу поглощения при 290.6 нм.

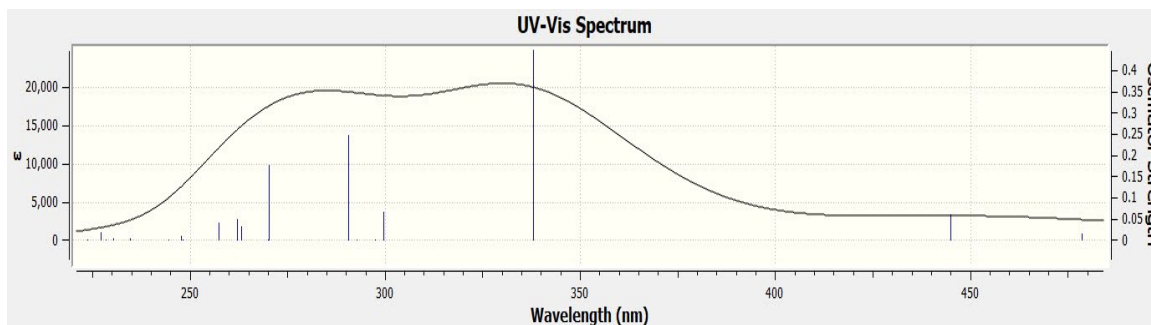


Рис. 2 – УФ-спектр комплекса псорален/СО, рассчитанного с помощью метода wB97XD/6-31G*

Третья полоса поглощения наблюдается при 270.3 нм с $f = 0.2408$ и относится к переходу в возбужденное синглетное состояние молекулы ($S_0 \rightarrow S_{12}$). Расчеты показывают, что данное возбужденное состояние описывается волновой функцией, отвечающей наложению четырех конфигураций для одноэлектронных возбуждений (таблица 2, рисунок 3). Возбуждение электрона с (36→44) дает главный вклад в полосу поглощения при 270.3 нм.

Другие возбужденные состояния исследуемого комплекса имеют очень малую интенсивность ($f \approx 0$). Данные переходы запрещены по симметрии.

В настоящей работе представлены результаты исследования физической сорбции псоралена с СО, используя метод wB97XD/6-31G*.

Выявлено, что электронные свойства псоралена чувствительны к адсорбции СО. Заряд атомов исследуемых соединений подвергается изменению при несвязывающем взаимодействии с СО. Установлено, что λ_{\max} псоралена при несвязанном взаимодействии с СО. меняется не значительно.

Результаты свидетельствуют о несвязанном взаимодействии между псораленом и СО. Таким образом, доказано, что псорален может быть использован в разработке отечественных фильтров для очистки воздуха от СО.

ЛИТЕРАТУРА

1. Bagayoko D. Understanding the Relativistic Generalization of Density Functional Theory (DFT) and Completing It in Practice / Bagayoko D // Journal of Modern Physics. – Vol.7. No.9. – 2016 May 26. – P. 4236.
2. Changqing, Y. A Generation Method of Dithering Signal Based on DFT / Changqing Y, Xingzhong X // International Journal of Communications, Network and System Sciences. – Vol.10. – No.8. 2017 August 14. – P. 245–271.
3. Cheplya, V. Theoretical model of physisorption effect of CO on coniine and furanocoumarins for air purification / Cheplya V, Shahab S, Murashko M // IX International Scientific Conference for Young Scientists, Graduates, Master and PhD Students “Actual Environmental Problems”: International Sakharov Environmental Institute of Belarusian State University. – 2019 November 21–22. – P. 324–325.
4. Fidel, L. Breeding and Analysis of Two New Grapefruit-Like Varieties with Low Furanocoumarin Content / Fidel L, Carmeli-Weissberg M, Yaniv Y, Shaya F, Dai N, Ravch E, Eyal Y, Porat R, Carmi N // Food and Nutrition Sciences. – Vol.7. No.2. – 2016 February 23. – P. 428–439.
5. Shahab S. DFT study of physisorption effect of CO and CO₂ on furanocoumarins for air purification / Shahab S, Sheikhi M, Khaleghian M, Kumar R, Murashko M. // Journal of Environmental Chemical Engineering. – 2018. – P. 4784–4796.

ТИРЕОИДНЫЕ ГОРМОНЫ У КРЫС ПРИ ОЖИРЕНИИ: ОСОБЕННОСТИ РЕАКЦИИ НА СТРЕСС

THYROID HORMONES IN OBESE RATS: FEATURES OF THE RESPONSE TO STRESS

Е. Н. Чудиловская¹, А. А. Басалай¹, А. С. Мигалевич¹, В. Д. Свирид², Т. А. Митюкова¹
E. N. Chudilovskaya¹, A. A. Basalai¹, A. S. Migalevitch¹, V. D. Svirid², T. A. Mityukova¹

¹ГНУ Институт физиологии НАН Беларуси, г. Минск, Республика Беларусь

²Белорусский государственный университет, МГЭИ им. А.Д. Сахарова БГУ,

г. Минск, Республика Беларусь

asvirid@tut.by

¹Institute of Physiology of the National Academy of Sciences of Belarus,
Minsk, Republic of Belarus

²Belarusian State University, ISEI BSU
Minsk, Republic of Belarus