

Визуальное представление страницы-проводника реализовано в классе SearchBrowsePageModel.xaml.cs. Данные подгружаются через GET запрос, с помощью интерфейсов IFoldersApi для получения папок и IMaterialsApi для получения сведений о материалах (химических веществах). Получение данных происходит в момент инициализации данной страницы – в методе InitAsync.

В методе InitAsync происходит отправка запроса для получения папок и запроса для получения сведений о материалах (химических веществах). Модель ответа FoldersResponse имеет поля Name, Id, ParentId.

После получения данных происходит выборка папок первого поколения (начальное состояние страницы-проводника) с помощью запросов LINQ (Language-Integrated Query). В качестве источника данных могут выступать объекты различных типов, но независимо от типа источника LINQ работает одинаково. На этой же странице организован поиск веществ с предоставлением всей интересующей пользователя информации с использованием фильтров, сортировки по нескольким критериям, статуса (всего 3 статуса: active – в данный момент вещество используется, located – имеется на складе, pending – ожидание поступления на склад). При изменении значения поля “Status” автоматически происходит выборка материалов, статус которых соответствует выбранному, и обновление их свойств.

Со страницы материалов есть возможность перейти к редактированию конкретного химического вещества и внести необходимые данные.

Для отображения месторасположения конкретного химического вещества на складе или в структурном подразделении предприятия подключаются карты Google Map. Создание этого блока связано с тем, что часто различные подразделения предприятия территориально разделены.

Взаимодействие созданного прототипа мобильного приложения с сайтом учета химических веществ, используемых на производстве, обеспечивает реализацию основных требований к программному продукту, в том числе ограничение доступа к хранящимся данным, создание пользователями удобной файловой системы для быстрого доступа к необходимым данным, подключение карт Google Map для отображения местоположения конкретного химического вещества, редактирование и сортировку данных.

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ ФЛУДАРАБИН ФОСФАТА С ЭМОКСИПИНОВОЙ СОЛЬЮ (F-PE) QUANTUM-CHEMICAL CALCULATION OF FLUDARABINE-P WITH EMOXIPINE SALT (F-PE)

***М. А. Атрошко, С. Альбасри
M. A. Atroshko, S. Albasri***

*Белорусский государственный университет, МГЭИ им. А. Д. Сахарова БГУ, Минск,
Республика Беларусь*

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

atroshkomikhail@gmail.com

yuridragonv@gmail.com

В работе приведены данные полуэмпирических и теоретических расчетов молекул в среде растворителя, их спектр поглощения и оптимизированная структура с значением полной энергии системы.

The paper presents the data of semi-empirical and theoretical calculations of molecules in the medium of the solvent, their absorption spectrum and the optimized structure with the value of the total energy of the system.

Ключевые слова: PM6, DFT, спектр.

Keywords: PM6, DFT, spectra.

<https://doi.org/10.46646/SAKH-2021-2-398-401>

Предварительное квантово-химическое моделирование молекулы

Для расчетов использован персональный компьютер с процессором intel core i7 (2.21 GHz CPU) с установленной операционной системой Ubuntu 18.04. При вычислениях стартовой геометрии молекулы с азометиновым основанием выбран метод молекулярной механики (ММ⁺) программного пакета HyperChem 08. Выбор метода ММ⁺ обоснован тем, что он разработан для органических молекул, учитывает потенциальные поля, формируемые всеми атомами рассчитываемой системы, и позволяет гибко модифицировать параметры расчета в зависимости от конкретной задачи. Стартовую геометрию молекулы дополнительно оптимизировали в среде растворителя воды (water) полуэмпирическим методом PM6 программного пакета Gaussian 16 до достижения глобального минимума

полной энергии изучаемых систем. Для нахождения глобального энергетического минимума и наиболее устойчивых конформеров анализировали все стационарные точки на поверхности потенциальной энергии молекул. Методом РМ6 находят оптимизированные геометрические конфигурации, общую энергию молекул, электронные свойства и энтальпию образования веществ. Для визуализации результатов использована программа Gauss View 06. Равновесная геометрия молекулы полуэмпирическим методом РМ6 приведена на рисунке 1.

$E = -2071.31$ Hartree

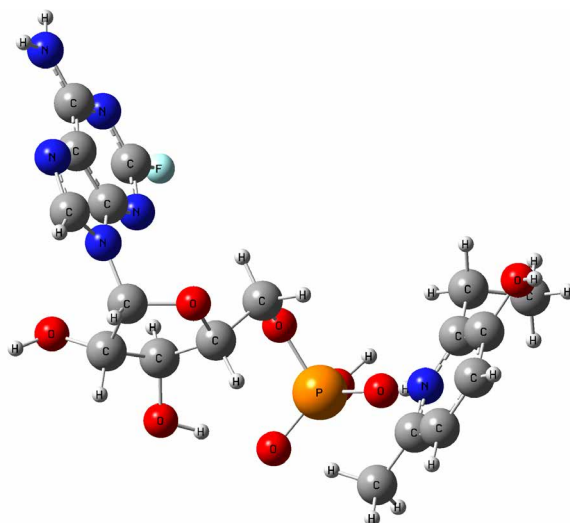


Рис. 1 – Оптимизированная молекула F-PE методом РМ6

Полное квантово-химическое моделирование равновесной геометрии и электронной структуры молекулы

Полная оптимизация и расчет электронной структуры проводились неэмпирическим методом DFT/ RB3LYP в базисе 6-31++G. Данный метод используется для расчета оптимизированных геометрий, электронных абсорбционных спектров, значений полной энергии и теплоты образования и применен нами для расчета электронного спектра поглощения молекул. Электронный спектр молекулы F-PE рассчитан для 20 одноэлектронных возбуждений в области нм. Результаты расчета абсорбционного спектра даны в таблице 1.

Таблица 1 – Рассчитанный электронный спектр поглощения молекулы F-PE

Состояние	Длина волны, нм	Энергия перехода, эВ	Разложение волновых функций по однократно возбужденной конфигурации		Сила осциллятора (f)
$S_0 \rightarrow S_1$	292.26	4.2422	131 ->132	0.70700	0.00
$S_0 \rightarrow S_2$	272.33	4.5528	118 ->134 130 ->132	-0.12085 0.69018	0.1961
$S_0 \rightarrow S_3$	254.51	4.8714	129 ->132	0.69533	0.0001
$S_0 \rightarrow S_4$	252.39	4.9124	125 ->132 126 ->132 127 ->132 128 ->132	-0.12413 0.13321 -0.11097 0.66532	0.0013
$S_0 \rightarrow S_5$	248.07	4.9980	131 ->133 131 ->136	0.66109 0.14134	0.3372
$S_0 \rightarrow S_6$	243.10	5.1001	123 ->133 126 ->133 128 ->133 129 ->133 131 ->133 131 ->135 131 ->136	0.11624 -0.18542 0.13365 0.12933 -0.19159 0.33379 0.48582	0.0472
$S_0 \rightarrow S_7$	241.83	5.1270	127 ->133 128 ->133 129 ->133 131 ->136	0.43928 0.16360 0.48437 -0.13179	0.0054
$S_0 \rightarrow S_8$	238.21	5.2048	+ 125 ->132 127 ->132 128 ->132	0.58550 0.30338 0.19223	0.0004
$S_0 \rightarrow S_9$	236.47	5.2431	123 ->132 124 ->132 125 ->132 127 ->132	-0.23042 -0.35568 -0.23387 0.49568	0.0049

Состояние	Длина волны, нм	Энергия перехода, эВ	Разложение волновых функций по однократно возбужденной конфигурации		Сила осциллятора (f)
$S_0 \rightarrow S_{10}$	232.34	5.3364	125 -> 132 126 -> 132 128 -> 132	0.14594 0.67262 -0.11113	0.0004
$S_0 \rightarrow S_{11}$	231.65	5.3523	122 -> 132 123 -> 132 124 -> 132 125 -> 132 127 -> 132	-0.12010 0.36302 0.39786 -0.19858 0.38068	0.0049
$S_0 \rightarrow S_{12}$	230.27	5.3843	131 -> 134 131 -> 135 131 -> 136	0.66156 0.15398 -0.18531	0.0000
$S_0 \rightarrow S_{13}$	227.95	5.4390	131 -> 134 131 -> 135 131 -> 136	-0.23313 0.57847 -0.31994	0.0000
$S_0 \rightarrow S_{14}$	224.25	5.5289	122 -> 132 123 -> 132 124 -> 132 125 -> 132 126 -> 132	-0.33936 0.41902 -0.41515 0.12588 -0.12152	0.0025
$S_0 \rightarrow S_{15}$	223.99	5.5352	130 -> 133	0.70677	0.0000
$S_0 \rightarrow S_{16}$	222.36	5.5758	127 -> 135 127 -> 136 128 -> 135 128 -> 136 129 -> 135 129 -> 136	0.17046 0.37009 0.10770 0.16809 0.30452 0.42268	0.0032
$S_0 \rightarrow S_{17}$	218.88	5.6645	125 -> 135 125 -> 136 126 -> 135 127 -> 135 128 -> 134 128 -> 135 128 -> 136 129 -> 135	-0.23343 0.10965 0.17878 -0.10544 0.19197 0.51199 -0.16585 -0.11008	0.0085
$S_0 \rightarrow S_{18}$	218.39	5.6773	125 -> 133 128 -> 133 129 -> 133	0.10551 0.61420 -0.28737	0.0199
$S_0 \rightarrow S_{19}$	217.65	5.6965	124 -> 133 125 -> 133 127 -> 133 128 -> 133 129 -> 133	0.10242 -0.18883 0.48767 -0.17273 -0.38185	0.0174
$S_0 \rightarrow S_{20}$	216.33	5.7312	118 -> 132 122 -> 132 130 -> 134 130 -> 135	0.26333 -0.10461 0.56835 0.25293	0.0526

Первая интенсивная полоса поглощения с максимумом при 272.33 нм относится к переходу в возбужденное синглетное состояние молекулы ($S_0 \rightarrow S_2$). Расчеты показывают, что данное возбужденное состояние описывается волновой функцией, отвечающей наложению двух функций: (118 -> 134), (130 -> 132). Возбуждение электрона с 130 молекулярной орбитали (МО) на нижнюю вакантную молекулярную орбиталь 132 дает главный вклад в полосу поглощения при 272.33 нм (табл. 1, рис. 2,3).

Вторая широкая и интенсивная полоса поглощения с максимумом при 202.74 нм относится к переходу в возбужденное синглетное состояние молекулы ($S_0 \rightarrow S_5$). Расчеты показывают, что данное возбужденное состояние описывается волновой функцией, отвечающей наложению восьми функций: (131 -> 133), (131 -> 136). Возбуждение электрона с 131 МО на 133 МО дает главный вклад в полосу поглощения при 202.74 нм (табл. 1, рис. 2,3). Остальные переходы имеют маленькое значение f и запрещены по симметрии.

Теоретический спектр поглощения оптимизированной молекулы в среде растворителя рассчитан с помощью программного пакета Gaussian 16, используя уровень теории RB3LYP/6-31++G. Усредненный масштабирующий коэффициент программы при расчете УФ спектров равен 0.99. Рассчитанный электронный спектр поглощения молекулы в среде растворителя представлен на рисунке 2 [1,2].

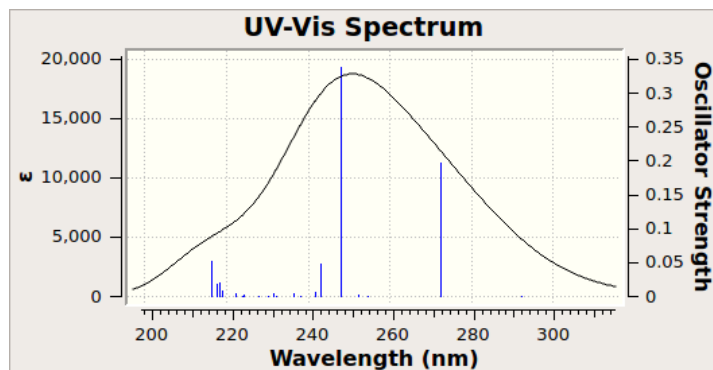
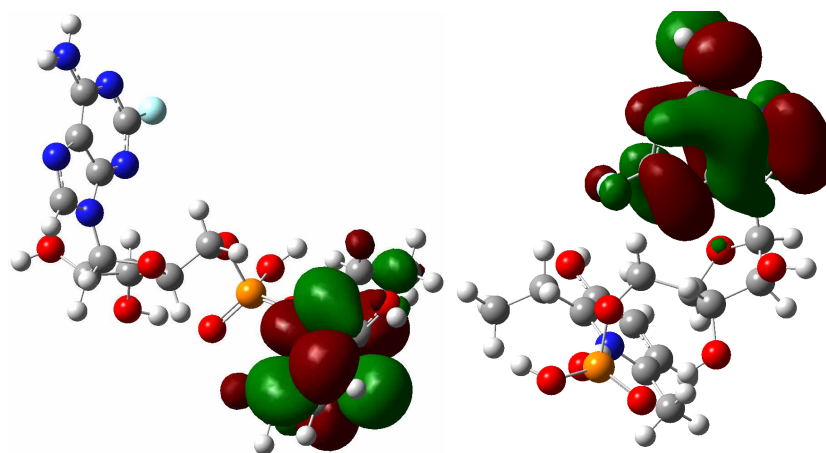


Рис. 2 – Спектр поглощения молекулы



HOMO

LUMO

Рис. 3 – Виды молекулярных орбиталей, участвующих в образовании спектра поглощения молекулы F-PE при $\lambda = 272.33$ нм

ЛИТЕРАТУРА

1. Srdana Grgurevic, Patricia Montilla-Perez, Alice Bradbury, et al. DNA polymerase γ gene expression influences fludarabine resistance in chronic lymphocytic leukemia independently of p53 status. *Haematologica* 2018;103(6):1038-1046; <https://doi.org/10.3324/haematol.2017.174243>.
2. Siyamak Shahab*, Masoome Sheikhi, Mehrnoosh Khaleghian, Marina Murashko, Mahin Ahmadianarog and Mikhail Atroshko, "Investigation of Adsorption Effect of Carbon Monoxide on Coniine: A DFT Study", *Letters in Organic Chemistry* (2020) 17: 1. <https://doi.org/10.2174/1570178617666210108114822>

БИОПРОТЕЗИРОВАНИЕ, ПРОГРАММИРОВАНИЕ И ИСПОЛЬЗОВАНИЕ БИОНИЧЕСКИХ ПРОТЕЗОВ

BIOPROSTHETICS, PROGRAMMING AND USE OF BIONIC PROSTHESES

Д. Д. Вышидкевич, Е. А. Васюкевич, Л. А. Липницкий
D. D. Vyshidkevich, E. A. Vasykevich, L. A. Lipnickij

Белорусский государственный университет, МГЭИ им. А. Д. Сахарова БГУ,
 г.Минск, Республика Беларусь

yc9911111@gmail.com

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

В современном мире проходит активное развитие технологий и роботизация бесчисленного числа производств, но несмотря на это, уровень травматизма по всему миру сохраняется на прежнем уровне. Ежегодно, по тем или иным причинам, более 50 миллионов человек приобретают инвалидность. Потеря конечностей