

Conclusion. Using the PM6 method to measure this the molecule the N-(5-(tert-butyl)-2-hydroxyphenyl) methanesulfonamide in the solvent medium of water (H₂O), and the maximum wavelength with high oscillator strength was observed at 298.78 nm and f=0.5411. Results of molecular orbitals are LUMO (N=46) [0.379eV] and HOMO (N=45) [-8.797eV].

REFERENCES

1. *Sheikhi, M., Koroleva, E., Shahab, S., Ihnatovich, Z., Atroshko, M., Drachilovskaya, M. Filipovich, L., Pnak, A.* Spectroscopic (FT-IR, excited states, UV/Vis, polarization) properties, synthesis and quantum chemical studies of new azomethine derivatives // Journal «Dyes and pigments».
2. *Mikulski, D., Eder, K., & Molski, M.* (2014). Quantum-chemical study on relationship between structure and antioxidant properties of hepatoprotective compounds occurring in *Cynara scolymus* and *Silybum marianum*. Journal of Theoretical and Computational Chemistry, 13(01), 1450004.

ПРОГРАММА ЕЖЕДНЕВНОЙ ПРОЦЕДУРЫ ГАРАНТИИ КАЧЕСТВА НА ЛИНЕЙНОМ УСКОРИТЕЛЕ ЭЛЕКТРОНОВ

PROGRAM OF THE DAILY QUALITY ASSURANCE PROCEDURE ON THE ELECTRON LINEAR ACCELERATOR

Г. В. Бельков¹, А. И. Бринкевич²
G. Belkov¹, A. Brynkevich²

¹Минский городской клинический онкологический центр
г. Минск, Республика Беларусь

²Республиканский научно-практический центр онкологии и медицинской радиологии
им. Н.Н. Александрова, а-г Лесной, Республика Беларусь

¹Minsk city clinical oncological centre,
Minsk, Republic of Belarus

²N. N. Alexandrov national cancer centre of Belarus, Lesnoy, Republic of Belarus
g.belkov@inbox.ru

Осуществление мероприятий по контролю качества работы медицинских линейных ускорителей – один из элементов радиационной защиты пациентов, подвергающихся медицинскому терапевтическому облучению, который в то же время является важнейшим из составляющих программы гарантии качества лучевой терапии. Контроль качества линейных ускорителей позволяет полностью выдержать заданные параметры плана облучения каждого пациента и избежать его переоблучения или недооблучения, а также тяжелых радиационных аварий.

The implementation of quality control measures for the operation of medical linear accelerators is one of the elements of radiation protection of patients undergoing medical therapeutic radiation, which at the same time is the most important component of the radiotherapy quality assurance program. The quality control of linear accelerators makes it possible to fully comply with the specified parameters of the exposure plan for each patient and avoid overexposure or underexposure, as well as severe radiation accidents.

Ключевые слова: лучевая терапия, гарантия качества, линейный ускоритель электронов, доза, онкология, медицинская физика.

Keywords: radiation therapy, quality assurance, linear electron accelerator, dose, oncology, medical physics.

<https://doi.org/10.46646/SAKH-2022-2-388-391>

Наиболее важным аспектом контроля качества линейных ускорителей электронов является проведение ежедневной процедуры гарантии качества, которая проводится утром инженерами или медицинскими физиками, перед тем, как отдать аппарат в лечебную практику.

Все проверки, которые входят в программу проверки ежедневного контроля качества линейных ускорителей, можно разделить на четыре процедуры:

1. Дозиметрические,
2. механические,
3. безопасность,
4. изображение.

Прежде чем инженер или медицинский физик приступит к процедуре гарантии качества (ежедневной), он обязан прогреть аппарат отпустив 500 мониторных единиц на всех энергиях, которые введены в клинический режим на линейном ускорителе.



Рисунок 1 – Прогрев ЛУЭ

На рисунке 1 показан пример прогрева ЛУЭ [1]. Далее, медицинский персонал может приступать к механической проверке аппарата. Стоит отметить, что каждый онкологический центр в мире работает по протоколам, которые регламентируют те или иные допустимые значения для каждой проверки гарантии качества. В нашем случае были разработаны собственные протоколы на базе TG 142. Одна из важнейших проверок – точность лазеров, которые используются для позиционирования пациента при проведении сеанса лучевой терапии.

На рисунке 2 показана работа лазеров, которыми пользуется медицинский персонал для укладки пациентов и проведения им сеансов лучевой терапии. Аналогично с этой проверкой, к механическим проверкам входит: проверка светового поля, проверка раскрытия коллиматора.



Рисунок 2 – Лазера для позиционирования пациента

При проведении дозиметрических проверок может быть использовано вспомогательное оборудование, такое как PTW QUICKCHECK. Устройство, в корпусе которого находятся 13 вентилируемых ионизационных камер, при помощи которых получается высочайшая точность снятых параметров.

QUICKCHECK получает такие данные как [3], симметрия поля, флатность, качество пучка и значение дозы на центральной оси камеры. Данная процедура также проводится на каждой лечебной энергии аппарата.

Под безопасностью подразумеваются все системы защиты пациента при проведении сеанса лучевой терапии. В комплекс мер входит: проверка работы видео камер в каньоне, проверка аудио, проверка работы блокировки двери, блокировка пучка, световая сигнализация в каньоне и процедурном кабинете, проверка дозиметров и их световой индикации, а также система Touchgard (система предотвращения столкновения линейного ускорителя электронов с телом пациента) на головке линейного ускорителя, на панели детекторов для получения изображений и на рентгеновской трубке. Стоит отметить, что при любой неисправности связанной с безопасностью, персонал работающий в клинике должен сам устранить неисправность, а в случае не возможности устранения проблемы самостоятельно, обратиться в сервисную службу.

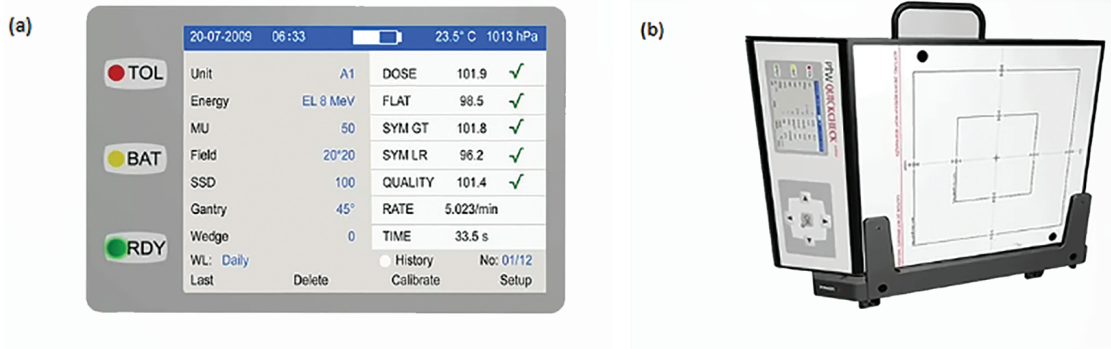


Рисунок 3 – (а) Дисплей с корпуса PTW QUICKCHECK с основными критериями;
(б) QUICKCHECK на зарядной платформе



Рисунок 4 – пример системы дозиметрического контроля в процедурном кабинете

Так же проверяется вся система линейного ускорителя электронов, отвечающая за получение качественного рентгеновского изображения. Важными составляющими в этой системе является рентгеновская трубка и панель детекторов на которой регистрируется изображение. Перед началом работы с системой, медицинский физик запускает прогрев рентгеновской трубки, а только после полного прогрева запускает саму процедуру. Для этого на лечебный стол устанавливается фантом PentaGuide и откатывается полный оборот ЛУЭ вокруг своей оси для получения изображения.

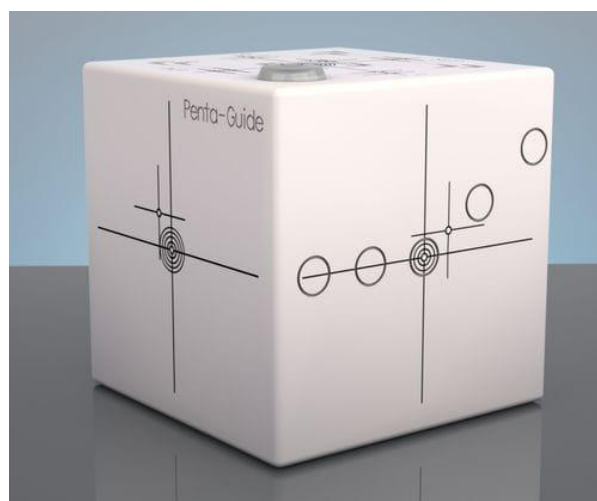


Рисунок 5 – Фантом PentaGuide

После проведения всех процедур[2], медицинский персонал, который занимался включением и проверкой аппаратов, заполняет бумажную документацию и отдает аппарат в лечебную практику, беря на себя ответственность за то, что лечение на данном аппарате будет соответствовать всем требованиям.

ЛИТЕРАТУРА

1. Тарутин, И. Г. Применение линейных ускорителей электронов в высокотехнологичной лучевой терапии / И. Г. Тарутин, Е. В. Титович. – Минск: Беларуская навука, 2014. – 175 с.
2. Черняев А.П. Медицинское оборудование в современной лучевой терапии: учебное пособие / А.П. Черняев, Е.Н. Лыкова, А.И. Поподько. – Москва: Изд-во физического факультета МГУ, 2019. – 101 с.
3. Medical electrical equipment – Medical electron accelerators - Functional performance characteristics IEC 60976:2007. – 16.10.07. – Geneva: International Electrotechnical Commission, 2007. – 199 p.

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ ПРОИЗВОДНЫХ ХАЛКОНОВ QUANTUM-CHEMICAL CALCULATION OF CHALCON DERIVATIVES

**М. А. Атрошко^{1,2}, С. Н. Шахаб^{1,2,3,4}, В. А. Тарасевич⁴,
Д. С. Мартинкевич⁴, Н. В. Богданова^{1,2}, Ван Хуэй²
M. A. Atroshko^{1,2}, S. Shahab^{1,2,3,4}, V. A. Tarasevich⁴,
D. A. Martsinkevich⁴, N. V. Bogdanova^{1,2}, W. Hui²**

¹Белорусский государственный университет, БГУ, Минск, Республика Беларусь

²Учреждение образования «Международный государственный экологический институт имени А. Д. Сахарова» Белорусского государственного университета, МГЭИ им. А. Д. Сахарова БГУ, Минск, Республика Беларусь

kbb@iseu.by, atroshkomikhail@gmail.com, siyamakshahab@mail.ru

³Институт физико-органической химии Национальной академии наук Беларуси, Минск, Республика Беларусь

⁴Институт химии новых материалов Национальной академии наук Беларуси, Минск, Республика Беларусь

atroshkomikhail@gmail.com, siyamakshahab@mail.ru, tar@ichnm.by

¹Belarusian State University, BSU, Minsk, Republic of Belarus

²International Sakharov Environmental Institute of Belarusian State University, ISEI BSU, Minsk, Republic of Belarus

³Institute of Physical Organic Chemistry National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Republic of Belarus

⁴Institute of Chemistry of New Materials National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Republic of Belarus

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, TD-DFT, спектр.

Keywords: PM6, TD-DFT, spectrum.

<https://doi.org/10.46646/SAKH-2022-2-391-393>

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 3-(2-бромфенил)-5-(4-бромфенил)-1Н-пиразол 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 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 PM6 находят оптимизированные геометрические конфигурации, общую энергию молекул, электронные свойства и энтальпию