

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)-1H-пиразол выбран метод молекулярной механики (MM⁺) программного пакета HyperChem 08. Выбор метода MM⁺ 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

образования веществ [2]. Для визуализации результатов использована программа Gauss View 06. Равновесная геометрия молекулы полуэмпирическим методом PM6 приведена на рисунке 1.

$$E = -5830.452361 \text{ Hartree}$$

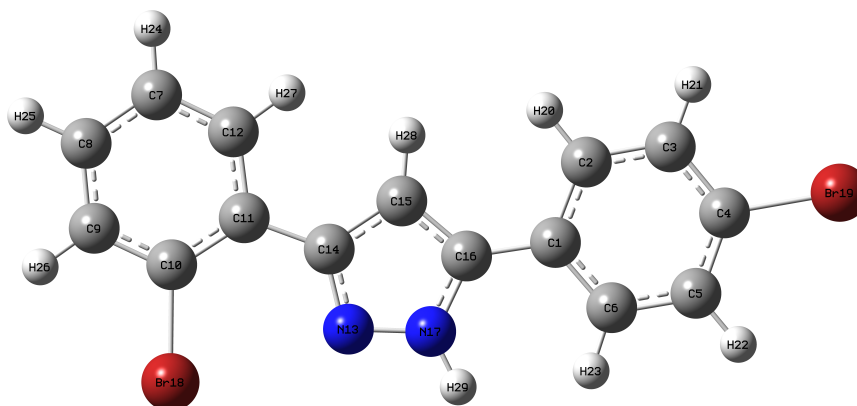


Рисунок 1 – Оптимизированная молекула 3-(2-бромфенил)-5-(4-бромфенил)-1H-пиразол методом PM6

Полное квантово-химическое моделирование равновесной геометрии и электронной структуры молекулы. Полная оптимизация и расчет электронной структуры проводились неэмпирическим методом TD-DFT/RB3LYP в базе 6-31++G. Данный метод используется для расчета геометрий, электронных абсорбционных спектров, значений полной энергии и теплоты образования и применен нами для расчета электронного спектра поглощения молекул. Электронный спектр молекулы рассчитан для 20 одноэлектронных возбуждений в области 294.86 нм. Результаты расчета абсорбционного спектра даны в таблице 1.

Таблица 1 – Рассчитанный электронный спектр поглощения молекулы

Состояние	Длина волны, нм	Энергия перехода, эВ	Разложение волновых функций по однократно возбужденной конфигурации	Сила осциллятора (f)
$S_0 \rightarrow S_1$	294.86	4.2049	92 -> 93 0.64093 92 -> 94 0.27005	1.1758
$S_0 \rightarrow S_2$	281.51	4.4042	91 -> 93 0.57048 91 -> 94 -0.12092 92 -> 94 0.35435	0.1780
$S_0 \rightarrow S_3$	272.95	4.5423	88 -> 93 -0.12149 91 -> 93 -0.35116 91 -> 94 0.12258 92 -> 93 -0.24377 92 -> 94 0.47794 92 -> 95 -0.20270	0.2952
$S_0 \rightarrow S_4$	265.93	4.6622	88 -> 93 0.16286 90 -> 93 -0.12171 90 -> 94 0.23917 91 -> 94 0.45168 91 -> 96 0.19737 92 -> 95 0.30064 92 -> 96 0.15997	0.0746
$S_0 \rightarrow S_5$	263.19	4.7107	88 -> 93 0.19435 90 -> 94 -0.33668 91 -> 95 -0.14098 91 -> 96 -0.20762 92 -> 94 0.16730 92 -> 95 0.39937 92 -> 96 -0.26549	0.0664
$S_0 \rightarrow S_6$	258.61	4.7943	88 -> 93 -0.10403 90 -> 93 0.10748 90 -> 94 -0.23756 91 -> 93 0.19392 91 -> 94 0.49543 92 -> 94 -0.14723 92 -> 95 -0.24883 92 -> 96 -0.18005	0.0652

Состояние	Длина волны, нм	Энергия перехода, эВ	Разложение волновых функций по однократно возбужденной конфигурации	Сила осциллятора (f)
$S_0 \rightarrow S_7$	249.78	4.9638	90 -> 93 0.67497 90 -> 94 0.12765 92 -> 96 0.11056	0.0385
$S_0 \rightarrow S_{10}$	241.74	5.1288	90 -> 94 -0.25631 91 -> 95 -0.18961 91 -> 96 -0.25964 92 -> 96 0.56347	0.0636
$S_0 \rightarrow S_{12}$	238.89	5.1901	88 -> 93 -0.14010 91 -> 95 0.59685 92 -> 95 0.26139 92 -> 96 0.15912	0.0409
$S_0 \rightarrow S_{13}$	231.38	5.3584	90 -> 94 -0.39680 91 -> 96 0.55685	0.4324
$S_0 \rightarrow S_{16}$	225.99	5.4862	87 -> 95 0.12282 88 -> 93 0.58937 91 -> 95 0.23873 92 -> 95 -0.23891	0.2306
$S_0 \rightarrow S_{19}$	220.37	5.6263	87 -> 93 0.67774 88 -> 95 -0.10012	0.0445

Первая интенсивная полоса поглощения с максимумом при 294.86 нм относится к переходу в возбужденное синглетное состояние молекулы ($S_0 \rightarrow S_1$). Расчеты показывают, что данное возбужденное состояние описывается волновой функцией, отвечающей наложению двух функций: (92 ->93), (92 ->94). Возбуждение электрона с 92 молекулярной орбитали (МО) на нижнюю вакантную молекулярную орбиталь 93 дает главный вклад в полосу поглощения при 294.86 нм (табл. 1, рис. 2).

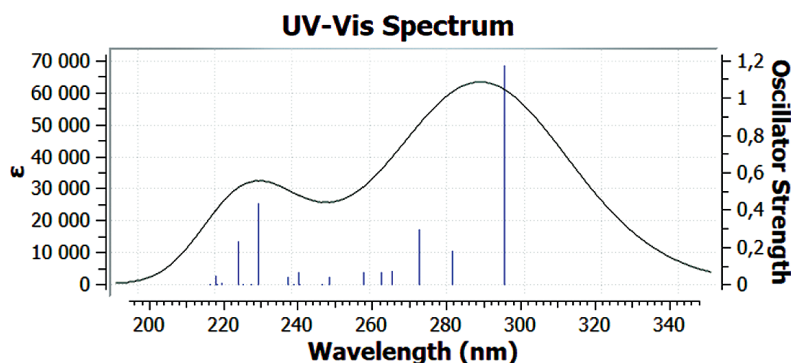


Рисунок 2 – Спектр поглощения молекулы

Вторая широкая и интенсивная полоса поглощения с максимумом при 272.95 нм относится к переходу в возбужденное синглетное состояние молекулы ($S_0 \rightarrow S_3$). Расчеты показывают, что данное возбужденное состояние описывается волновой функцией, отвечающей наложению шести функций. Возбуждение электрона с 92 МО на 94 МО дает главный вклад в полосу поглощения при 272.95 нм (табл. 1, рис. 2). 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 TD-DFT/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.

ЛИТЕРАТУРА

1. Siyamak Shahab, Masoome Sheikhi, Liudmila Filippovich, Evgenij Dikumar, Radwan A. Alnajjar, Mikhail Atroshko and Marina Drachilovskaya, "Antitumor and Antioxidant Activities of the New Synthesized Azomethine Derivatives: Experimental and Theoretical Investigations", Letters in Organic Chemistry (2020) 17:1.

2. Атрошко М.А., Шахаб С.Н. Квантово-химический расчет и синтез новых азометиновых соединений, обладающих антиоксидантной активностью / Атрошко М.А., Шахаб С.Н. // Сахаровские чтения 2019 года: Экологические проблемы XXI века, Минск, 23–24 мая 2019 г. – С. 62–65.