

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ ПРОИЗВОДНЫХ БИОГЕННЫХ КИСЛОТ QUANTUM-CHEMICAL CALCULATION OF BIOGENIC ACID DERIVATIVES

**М. А. Атрошко^{1,2}, С. Н. Шахаб^{1,2,3,4}, Е. Г. Каранкевич³,
Н. В. Богданова^{1,2}, З. И. Куваева³, Ян Шу²**
**М. А. Atroshko^{1,2}, S. Shahab^{1,2,3,4}, H. G. Karankevich³,
N. V. Bogdanova^{1,2}, Z. I. Kuvavaeva³, Y. Shu²**

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

¹Институт физико-органической химии Национальной академии наук Беларуси, Минск, Республика Беларусь

²Институт химии новых материалов Национальной академии наук Беларуси, Минск, Республика Беларусь
atroshkomikhail@gmail.com, siyamakshahab@mail.ru, extract@ifoch.bas-net.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-2022-2-394-396>

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

$E = -1670.034261$ Hartree

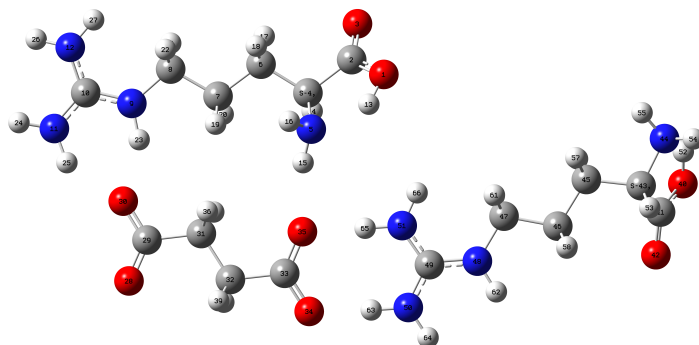


Рисунок 1 – Оптимизированная молекула аминокислоты метанимина методом PM6

Полное квантово-химическое моделирование равновесной геометрии и электронной структуры молекулы. Полная оптимизация и расчет электронной структуры проводились неэмпирическим методом TD-DFT/RB3LYP в базисе 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 226.46 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)
$S_0 \rightarrow S_3$	217.83	5.6918	125 ->126 -0.23480 125 ->127 0.41843 125 ->128 -0.27661 125 ->130 -0.13390 125 ->131 -0.21702 125 ->134 -0.24118	0.0325
$S_0 \rightarrow S_7$	211.13	5.8724	123 ->133 0.20734 123 ->142 0.20095 124 ->128 -0.12929 124 ->131 -0.10829 124 ->133 0.39529 124 ->142 0.30227 125 ->133 0.16731 125 ->142 0.11651	0.0385
$S_0 \rightarrow S_{10}$	207.43	5.9772	124 ->126 -0.30691 124 ->128 0.49696 124 ->134 0.15679 125 ->129 0.16077 125 ->134 0.16340	0.0275
$S_0 \rightarrow S_{13}$	204.61	6.0594	123 ->126 0.11632 123 ->127 -0.20114 124 ->126 -0.12221 124 ->127 0.12694 124 ->129 0.36898 124 ->130 0.18503 124 ->131 -0.10419 124 ->134 0.10351 125 ->128 0.19441 125 ->129 -0.16732 125 ->130 -0.11049 125 ->133 0.10030 125 ->134 -0.22637	0.0172
$S_0 \rightarrow S_{15}$	203.22	6.1009	119 ->127 -0.10144 123 ->126 -0.17918 123 ->127 0.26716 123 ->129 -0.10126 124 ->128 -0.16891 124 ->129 0.26138 124 ->130 0.14174 125 ->128 -0.16716 125 ->131 0.16790 125 ->133 0.19706 125 ->134 0.13283	0.0119
$S_0 \rightarrow S_{16}$	202.61	6.1194	123 ->126 0.15154 123 ->127 -0.23162 124 ->129 -0.12322 124 ->131 0.17580 125 ->131 0.38683 125 ->133 0.11475 125 ->135 0.16939 125 ->136 0.10626 125 ->142 -0.11392 125 ->143 -0.15137 125 ->145 0.13913 125 ->149 0.10531	0.0107

Первая интенсивная полоса поглощения с максимумом при 217.83 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 125 молекулярной

орбитали (МО) на нижнюю вакантную молекулярную орбиталь 127 дает главный вклад в полосу поглощения при 294.86 нм (табл. 1, рис. 2).

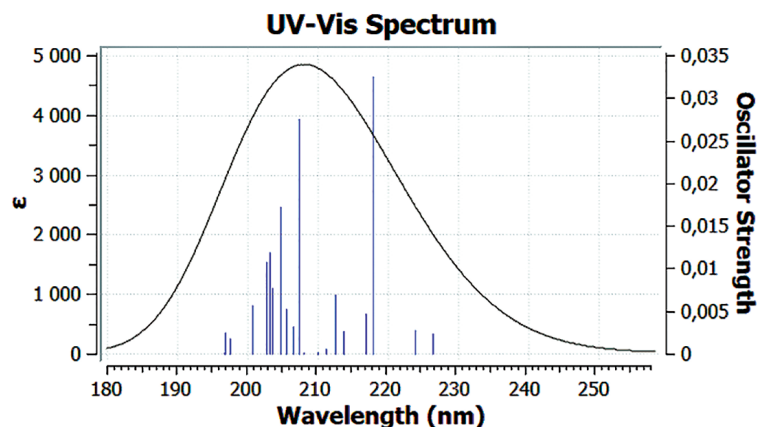


Рисунок 2 – Спектр поглощения молекулы

Вторая широкая и интенсивная полоса поглощения с максимумом при 207.43 нм относится к переходу в возбужденное синглетное состояние молекулы ($S_0 \rightarrow S_{10}$). Расчеты показывают, что данное возбужденное состояние описывается волновой функцией, отвечающей наложению пяти функций. Возбуждение электрона с 124 МО на 128 МО дает главный вклад в полосу поглощения при 207.43 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.

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ ПИРИМИДИНОВЫХ ОСНОВАНИЙ QUANTUM-CHEMICAL CALCULATION OF PYRIMIDINE BASES

М. А. Атрошко^{1,2}, С. Н. Шахаб^{1,2,3,4},

Ж. В. Игнатович³, Н. В. Богданова^{1,2}, Ян Шу², Ван Хуэй²

M. A. Atroshko^{1,2}, S. Shahab^{1,2,3,4}, J. V. Ignatovich³, N. V. Bogdanova^{1,2}, Y. Shu², 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, ignatovich@ichnm.basnet.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