

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

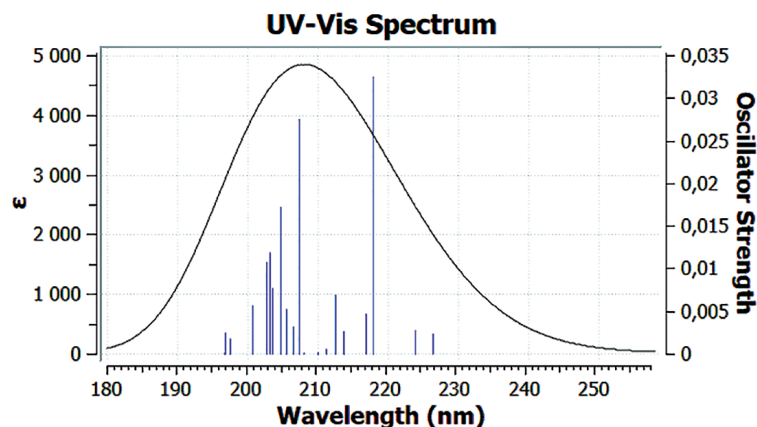


Рисунок 2 – Спектр поглощения молекулы

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 Dikudar, 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<sup>1,2</sup>, С. Н. Шахаб<sup>1,2,3,4</sup>,**

**Ж. В. Игнатович<sup>3</sup>, Н. В. Богданова<sup>1,2</sup>, Ян Шу<sup>2</sup>, Ван Хуэй<sup>2</sup>**

**M. A. Atroshko<sup>1,2</sup>, S. Shahab<sup>1,2,3,4</sup>, J. V. Ignatovich<sup>3</sup>, N. V. Bogdanova<sup>1,2</sup>, Y. Shu<sup>2</sup>, W. Hui<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>Белорусский государственный университет, БГУ, Минск, Республика Беларусь

<sup>2</sup>Учреждение 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*

<sup>1</sup>Институт физико-органической химии Национальной академии наук Беларуси, Минск, Республика Беларусь

<sup>2</sup>Институт химии новых материалов Национальной академии наук Беларуси, Минск, Республика Беларусь

*atroshkomikhail@gmail.com, siyamakshahab@mail.ru, ignatovich@ichnm.basnet.by*

<sup>1</sup>Belarusian State University, BSU, Minsk, Republic of Belarus

<sup>2</sup>International Sakharov Environmental Institute of Belarusian State University, ISEI BSU, Minsk, Republic of Belarus

<sup>3</sup>Institute of Physical Organic Chemistry National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Republic of Belarus

<sup>4</sup>Institute 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-2022-2-396-399>

**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 N-(4-метил-3-((4-(пиридин-3-ил)пиримидин-2-ил)амино)фенил)циннамид выбран метод молекулярной механики (MM<sup>+</sup>) программного пакета HyperChem 08. Выбор метода MM<sup>+</sup> 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 = -1314.249051 Hartree

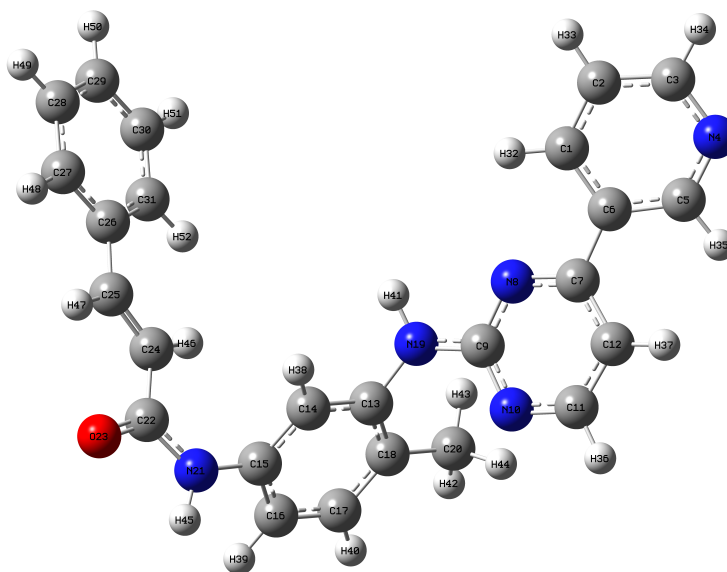


Рисунок 1 – Оптимизированная молекула N-(4-метил-3-((4-(пиридин-3-ил)пиримидин-2-ил)амино)фенил)циннамид методом PM6

**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 294.86 нм. Результаты расчета абсорбционного спектра даны в таблице 1.

Первая интенсивная полоса поглощения с максимумом при 278.42 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 107 молекулярной орбитали (МО) на нижнюю вакантную молекулярную орбиталь 110 дает главный вклад в полосу поглощения при 278.42 нм (табл. 1, рис. 2).

Таблица 1 – Рассчитанный электронный спектр поглощения молекулы

| Состояние                | Длина волны, нм | Энергия перехода, эВ | Разложение волновых функций по однократно возбужденной конфигурации  | Сила осциллятора (f) |
|--------------------------|-----------------|----------------------|--|----------------------|
| $S_0 \rightarrow S_1$    | 348.00          | 3.5628               | 106 ->108 0.17118<br>107 ->108 0.68201   | 0.3123               |
| $S_0 \rightarrow S_2$    | 340.12          | 3.6453               | 106 ->109 -0.17258<br>107 ->109 0.67615  | 0.0845               |
| $S_0 \rightarrow S_3$    | 323.19          | 3.8362               | 106 ->108 0.67684<br>107 ->108 -0.17349  | 0.4245               |
| $S_0 \rightarrow S_4$    | 307.44          | 4.0328               | 102 ->109 -0.11418<br>104 ->109 -0.12640<br>105 ->109 0.21321<br>106 ->109 0.62216<br>107 ->109 0.17496  | 0.0663               |
| $S_0 \rightarrow S_5$    | 302.54          | 4.0981               | 105 ->108 0.69502  | 0.3603               |
| $S_0 \rightarrow S_6$    | 301.45          | 4.1130               | 102 ->109 0.51665<br>104 ->109 0.40242<br>106 ->109 0.17891  | 0.0087               |
| $S_0 \rightarrow S_7$    | 289.63          | 4.2808               | 99 ->108 0.11208<br>100 ->108 0.29182<br>101 ->108 0.60994   | 0.0401               |
| $S_0 \rightarrow S_8$    | 284.65          | 4.3557               | 102 ->109 0.13107<br>105 ->109 0.65187<br>106 ->109 -0.21456   | 0.1211               |
| $S_0 \rightarrow S_9$    | 281.15          | 4.4099               | 103 ->108 0.65530<br>105 ->113 -0.12326<br>106 ->113 0.14577   | 0.0286               |
| $S_0 \rightarrow S_{10}$ | 278.42          | 4.4531               | 105 ->109 -0.11067<br>106 ->110 -0.10001<br>107 ->110 0.50039<br>107 ->111 0.41218<br>107 ->114 -0.10899   | 0.4716               |
| $S_0 \rightarrow S_{11}$ | 273.58          | 4.5319               | 99 ->109 -0.35379<br>100 ->109 0.54552<br>101 ->109 -0.20034   | 0.0116               |
| $S_0 \rightarrow S_{12}$ | 269.92          | 4.5934               | 102 ->109 -0.14237<br>104 ->108 0.51563<br>104 ->109 0.13940<br>106 ->110 0.14359<br>107 ->110 -0.23820<br>107 ->111 0.21332   | 0.0875               |
| $S_0 \rightarrow S_{13}$ | 268.44          | 4.6187               | 99 ->109 0.10973<br>102 ->109 -0.34300<br>104 ->109 0.44252<br>107 ->110 0.30716<br>107 ->111 -0.21809   | 0.4092               |
| $S_0 \rightarrow S_{14}$ | 266.51          | 4.6521               | 102 ->109 0.17116<br>104 ->108 0.42122<br>104 ->109 -0.23655<br>106 ->110 -0.12536<br>107 ->110 0.17354<br>107 ->111 -0.38504  | 0.0279               |
| $S_0 \rightarrow S_{15}$ | 259.64          | 4.7752               | 102 ->108 0.66097  | 0.0088               |
| $S_0 \rightarrow S_{16}$ | 257.42          | 4.8165               | 102 ->108 -0.17241<br>105 ->111 -0.13670<br>106 ->110 -0.27554<br>106 ->111 -0.34173<br>106 ->114 0.10114<br>107 ->110 -0.12171<br>107 ->111 0.14355<br>107 ->112 0.37305<br>107 ->113 0.14731 | 0.0720               |

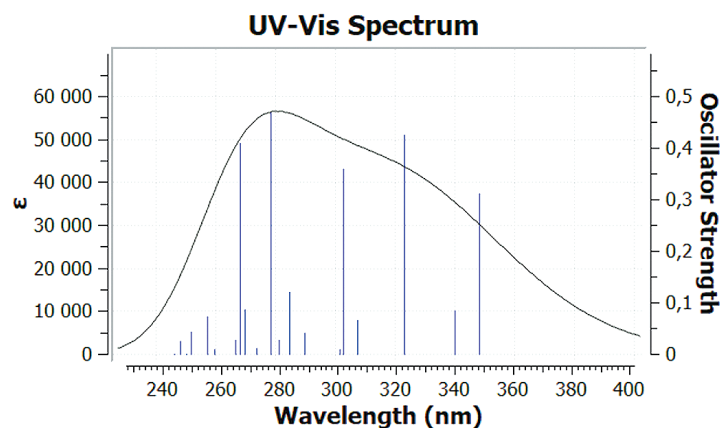


Рисунок 2 – Спектр поглощения молекулы

Вторая широкая и интенсивная полоса поглощения с максимумом при 323.19 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 двух функций. Возбуждение электрона с 106 МО на 108 МО дает главный вклад в полосу поглощения при 323.19 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 Sheikh, 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.

## ПРОГНОЗИРОВАНИЕ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ИНФЕКЦИОННЫХ ЗАБОЛЕВАНИЙ С ПОМОЩЬЮ АНАЛИЗА ВРЕМЕННЫХ РЯДОВ

### FORECASTING THE SPREAD OF INFECTIOUS DISEASES USING TIME SERIES ANALYSIS

**И. В. Лэфанова<sup>1,2</sup>, Т. В. Смирнова<sup>1,2</sup>**

**I. V. Lefanova<sup>1,2</sup>, T. V. Smirnova<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup>Белорусский государственный университет, БГУ, г. Минск, Республика Беларусь

<sup>2</sup>Учреждение образования «Международный государственный экологический институт имени А. Д. Сахарова» Белорусского государственного университета, МГЭИ им. А. Д. Сахарова БГУ, г. Минск, Республика Беларусь  
eis@iseu.by, irina.lefanova@gmail.com

<sup>1</sup>Belarusian State University, BSU, Minsk, Republic of Belarus

<sup>2</sup>International Sakharov Environmental Institute of Belarusian State University, ISEI BSU, Minsk, Republic of Belarus

В работе представлен обзор основных способов прогнозирования распространения эпидемий инфекционных заболеваний и формирования краткосрочных, так и долгосрочных проекций заболеваемости, а также рассматривается применение интегрированной модели авторегрессии – скользящего среднего ARIMA для прогнозирования распространения инфекционных заболеваний на примере данных о распространении COVID-2019 с web-ресурса <https://ourworldindata.org/coronavirus>

The paper presents an overview of the main methods for predicting the spread of epidemics of infectious diseases and the formation of short-term and long-term projections of morbidity, and also considers the use of an integrated