

**QUANTUM-CHEMICAL CALCULATION
OF N-(2-hydroxy-3,5-diisopropylphenyl) benzene sulfonamide COMPOUND
КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ
N-(2-гидрокси-3,5-диизопропилфенил) бензенсульфонамида**

**Zhang Zhibo^{1,2}, Siyamak Shahab^{1,2}, A. Labanava^{1,2}
Чжан Чжибо^{1,2}, Сиямак Шахаб^{1,2}, Е. Лобанова^{1,2}**

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

²International Sakharov Environmental Institute of Belarusian State University, ISEI BSU,
Minsk, Republic of Belarus
kbb@iseu.by., 844462834@qq.com

¹Белорусский государственный университет, БГУ, г. Минск, Республика Беларусь

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

This paper represents theoretical calculations related to newly synthesized phenol compound for defining its optimized geometry, free energy and form of molecular orbitals participated in formation of UV/Vis spectrum.

В этой статье представлены теоретические расчеты нового соединения N-(2-гидрокси-3,5-диизопропилфенил) бензенсульфонамида для определения его равновесной геометрии, свободной энергии и вида молекулярных орбиталей, участвующих в формировании спектра поглощения.

Keywords: computer chemistry, DFT, UV/Vis spectrum.

Ключевые слова: компьютерная химия, ДФТ, УФ спектр.

<https://doi.org/10.46646/SAKH-2022-2-403-405>

For calculations, we used a personal computer with an intel core i7 processor (2.21 GHz CPU) with the Ubuntu 18.04 operating system installed. When calculating the initial geometry of a molecule with an N-(2-hydroxy-3,5-diisopropylphenyl) benzene sulfonamide compound base, the method of molecular mechanics (MM+) of the Hyper Chem 08 software package was chosen. calculation parameters depending on the specific problem. The starting geometry of the molecule was additionally optimized in the solvent medium of Water by the semiempirical PM6 method of the Gaussian 16 software package until the global minimum of the total energy of the systems under study was reached. To find the global energy minimum and the most stable conformers, we analyzed all stationary points on the potential energy surface of molecules. The PM6 method is used to find optimized geometric configurations, the total energy of molecules, electronic properties, and the enthalpy of formation of substances [2]. The Gauss View 06 program was used to visualize the results. The equilibrium geometry of the molecule by the PM6 semiempirical method is shown in Figure 1.

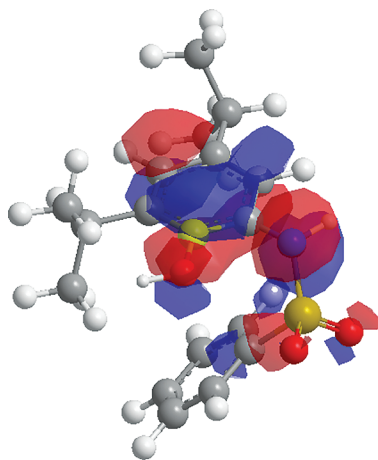


Figure 1 – Optimized molecule by PM6 method

Quantum Chemical Simulation of the Equilibrium Geometry and Electronic Structure of N-(2-hydroxy-3,5-diisopropylphenyl) benzenesulfonamide. Full optimization and calculation of the electronic structure were carried out by PM6 method. This method is used to calculate the optimized geometries, electronic absorption spectra, total energy

and heat of formation, and was used by us to calculate the electronic absorption spectrum of N-(2-hydroxy-3,5- diisopropylphenyl) benzenesulfonamide. Electronic spectrum of the N-(2-hydroxy-3,5- diisopropylphenyl) benzenesulfonamide is calculated for 10 one-electron excitations in the region 276.79-595.40 nm. The results of calculation of the absorption spectrum are given in the table.

The maximum wavelength with a high oscillator strength was observed at $\lambda = 291.63$ nm and $f = 0.0441$ (Table, Fig. 2, 3). The calculation showed that the strongest electron transition is observed at the absorption maximum of 291.63 nm, which refers to the electron transition to the excited singlet state

$S_0 \rightarrow S_8$. The remaining transitions have a small value of f and are forbidden by symmetry.

The theoretical absorption spectrum of the optimized molecule in a solvent medium was calculated using the Gaussian 16 software package using PM6 method. The calculated electronic absorption spectrum of a molecule in a solvent medium is shown in Figure 2.

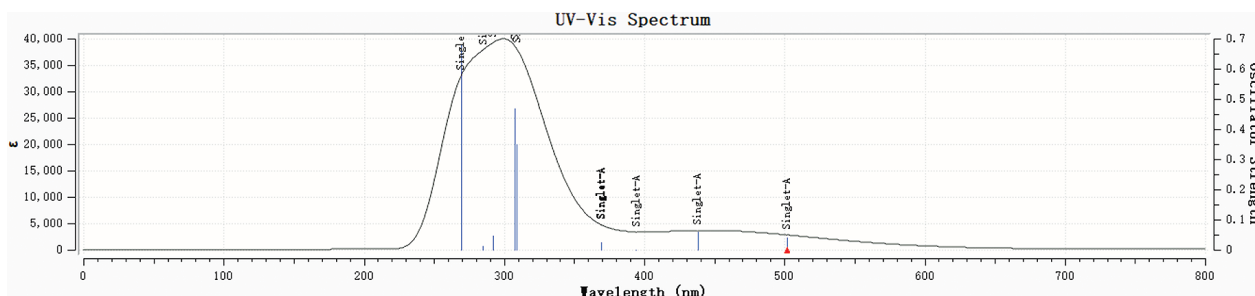


Figure 2 – Absorption spectrum of the title molecule

Table – Calculated electronic absorption spectrum of the molecule (A)

Excited State	Wavelength (nm)	Excitation Energy (eV)	Configurations Composition (corresponding transition orbitals)	Oscillator Strength (f)
$S_0 \rightarrow S_1$	502.50	2.4674	-0.15(61->64)-0.27(61->66)-0.10(62->63)-0.47(62->64)+0.21(62->66)-0.28(62->67)	0.0413
$S_0 \rightarrow S_2$	436.83	2.8383	0.22(61->64)+0.20(61->67)-0.29(62->64)-0.55(62->66)	0.0576
$S_0 \rightarrow S_3$	393.45	3.1512	0.12(40->68)-0.47(59->63)-0.46(60->65)	0.0016
$S_0 \rightarrow S_4$	369.30	3.3573	0.24(59->65)-0.46(60->63)+0.12(61->66)-0.14(62->63)-0.17(62->64)+0.32(62->67)	0.0395
$S_0 \rightarrow S_5$	365.49	3.3923	0.10(58->64)+0.22(59->65)-0.41(60->63)-0.12(61->66)+0.10(62->63)+0.21(62->64)-0.36(62->67)+0.10(62->71)	0.0163
$S_0 \rightarrow S_6$	309.12	4.0109	-0.30(61->64)+0.46(61->66)+0.15(62->64)-0.20(62->66)+0.25(62->67)	0.3583
$S_0 \rightarrow S_7$	307.58	4.0309	-0.30(61->64)+0.31(61->66)-0.33(61->67)-0.25(62->66)-0.12(62->67)	0.4533
$S_0 \rightarrow S_8$	291.63	4.2515	-0.11(61->67)-0.13(61->69)+0.45(62->69)-0.16(62->70)-0.27(62->71)-0.22(62->73)+0.11(62->78)	0.0441
$S_0 \rightarrow S_9$	284.18	4.3628	-0.64(62->63)+0.18(62->64)	0.0115
$S_0 \rightarrow S_{10}$	269.26	4.6046	0.47(59->63)-0.46(60->65)	0.6897

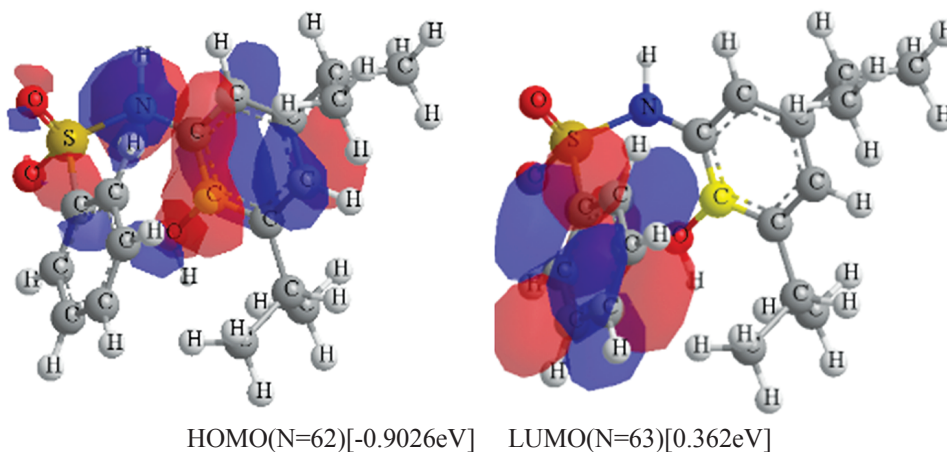


Figure 3 – Types of molecular orbitals involved in the formation of the absorption spectrum of a molecule (A) at $\lambda = 297.63$ nm

Conclusion. We used a personal computer with an intel core i7 processor (2.21 GHz CPU) with the Ubuntu 18.04 operating system installed. When calculating the initial geometry of a molecule with an N-(2-hydroxy-3,5-diisopropylphenyl) benzene sulfonamide compound base, the method of molecular mechanics (MM+) of the Hyper Chem 08 software package was chosen. The maximum wavelength with a high oscillator strength was observed at $\lambda = 291.63$ nm and $f = 0.0441$ (Table, Fig. 2,3). The calculation showed that the strongest electron transition is observed at the absorption maximum of 291.63 nm, which refers to the electron transition to the excited singlet state $S_0 \rightarrow S_8$. The remaining transitions have a small value of f and are forbidden by symmetry.

REFERENCES

1. *Shahab, S.* Interaction between new synthesized derivative of (E,E)-azomethines and BN(6,6-7) nanotube for medical applications: Geometry optimization, molecular structure, spectroscopic (NMR, UV/Vis, excited state), FMO, MEP and HOMO-LUMO investigations / S. Shahab [at all] // Journal of Molecular Structure. – 2017. – Vol. 1. – No. 1146. – P. 881–888.
2. *Sheikhi, M., Shahab, S., Filippovich, L., Khaleghian, M., Dikisar, E., Mashayekhi, M.* Interaction between new synthesized derivative of (E,E)-azomethines and BN(6,6-7) nanotube for medical applications: Geometry optimization, molecular structure, spectroscopic (NMR, UV/Vis, excited state), FMO, MEP and HOMO-LUMO investigations // Journal of Molecular Structure. – 2017. – No. 1146. – P. 881–888.

СИСТЕМА КОМПЬЮТЕРНОГО ЗРЕНИЯ И СОЗДАНИЕ ИНТЕРФЕЙСОВ УПРАВЛЕНИЯ В ДОПОЛНЕННОЙ РЕАЛЬНОСТИ

COMPUTER VISION SYSTEM AND CREATION OF CONTROL INTERFACES IN AUGMENTED REALITY

C. B. Ткаченко^{1,2}, Т. В. Смирнова^{1,2}

S. Tkachenko^{1,2}, T. Smirnova^{1,2}

¹Белорусский государственный университет, БГУ, г. Минск, Республика Беларусь

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

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

²International Sakharov Environmental Institute of Belarusian State University, ISEI BSU, Minsk, Republic of Belarus
smirnova@iseu.by

Представлены реализованные алгоритмы по созданию интерфейса «человек-компьютер», основанные на технологии компьютерного зрения и решении задачи распознавания компьютером жестов пользователя.

Implemented algorithms for creating a human-computer interface based on computer vision technology and solving the problem of recognizing user gestures by a computer are presented.

Ключевые слова: компьютерное зрение, CV, анализ изображений, дополненная реальность, ключевые точки руки, фреймворк MEDIAPIPE.

Keywords: computer vision, CV, image analysis, augmented reality, hand keypoints, framework MEDIAPIPE.

<https://doi.org/10.46646/SAKH-2022-2-405-408>

Введение. Вычислительные мощности современной компьютерной техники, повышение качества и скорости обработки аудио- и видеoinформации способны во многом изменить качество жизни современного человека. Автоматизированные системы и аппаратно-программные комплексы, основанные на обработке информации с помощью технологий компьютерного зрения и искусственного интеллекта – наиболее приоритетные направления прикладных исследований.

Компьютерное зрение – это область искусственного интеллекта, связанная с фиксацией и обработкой неподвижных и движущихся объектов при помощи компьютера. С помощью зрения люди воспринимают окружающий мир. Но использование зрительной системы человека ограничено рядом объективных и субъективных особенностей, что требует использования дополнительных устройств. Компьютерное зрение включает в себя набор методов, наделяющих компьютер способностью «увидеть» и извлечь из увиденного полезную информацию. Для этого используют технологии машинного обучения.