

**КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ
4-ФОРМИЛ-2-МЕТОКСИФЕНИЛ (3AS,6R,7S,7AR)-2-МЕТИЛ-1-
ОКСО-1,2,3,6,7,7A-ГЕКСАГИДРО-3A,6-ЭПОКСИИЗОИНДОЛ-7-КАРБОКСИЛАТА
QUANTUM-CHEMICAL CALCULATION OF 4-FORMYL-2-METHOXYPHENYL
(3AS,6R,7S,7AR)-2-METHYL-1-OXO-1,2,3,6,7,7A-HEXAHYDRO-3A,6-
EPOXYISOINDOLE-7-CARBOXYLATE**

**М. А. Атрошко¹, Е. Н. Степанова¹, З. В. Кононович¹, С. Парм¹, С. Н. Шахаб^{1,2,3}
M. A. Atroshko¹, E. N. Stepanova¹, Z. V. Kononovich¹, S. Part¹, S. N. Shahab^{1,2,3}**

¹Учреждение образования «Международный государственный экологический институт
имени А. Д. Сахарова» Белорусского государственного университета, МГЭИ им. А. Д. Сахарова БГУ,
г. Минск, Республика Беларусь
atroshkomikhail@gmail.com

²Институт химии новых материалов Национальной академии наук Беларуси, Минск,
Республика Беларусь

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

¹International Sakharov Environmental Institute of Belarusian State University, ISEI BSU,
Minsk, Republic of Belarus

²Institute of Chemistry of New Materials National Academy of Sciences of Belarus,
Minsk, Republic of Belarus

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

В работе приведены полуэмпирические и теоретические расчеты молекулы 4-формил-2-метоксифенил (3as,6r,7s,7ar)-2-метил-1-оксо-1,2,3,6,7,7a-гексагидро-3a,6-эпоксиизоиндол-7-карбоксилата, в среде растворителя (вода), ее спектр поглощения и оптимизированная структура с значением полной энергии системы.

The paper presents the data of semi-empirical and theoretical calculations of 4-formyl-2-methoxyphenyl (3AS,6R,7S,7AR)-2-methyl-1-oxo-1,2,3,6,7,7a-hexahydro-3a,6-epoxyisoindole-7-carboxylate molecule, in the solvent (water), their absorption spectrum and the optimized structure with the value of the total energy of the system.

Ключевые слова: эпоксиизоиндол, PM6, M06, TZVP, УФ спектр.

Keywords: epoxyisoindole, PM6, M06, TZVP, UV/Vis spectrum.

<https://doi.org/10.46646/SAKH-2024-1-394-397>

Предварительное квантово-химическое моделирование молекулы. Для расчетов использован персональный компьютер с процессором AMD Ryzen 5 1600 (2.21 GHz CPU) с установленной операционной системой Ubuntu 20.04.2. При вычислениях стартовой геометрии молекулы 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 (вода) 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 [1, 2]. Для визуализации результатов использована программа Gauss View 06. Равновесная геометрия молекулы полуэмпирическим методом PM6 приведена на рисунке 1.

Полное квантово-химическое моделирование равновесной геометрии и электронной структуры молекулы. Полная оптимизация и расчет электронной структуры проведена неэмпирическим методом M06 в базисе TZVP. Данный метод используется для расчета оптимизированных 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. Результаты расчета абсорбционного спектра даны в таблице 1.

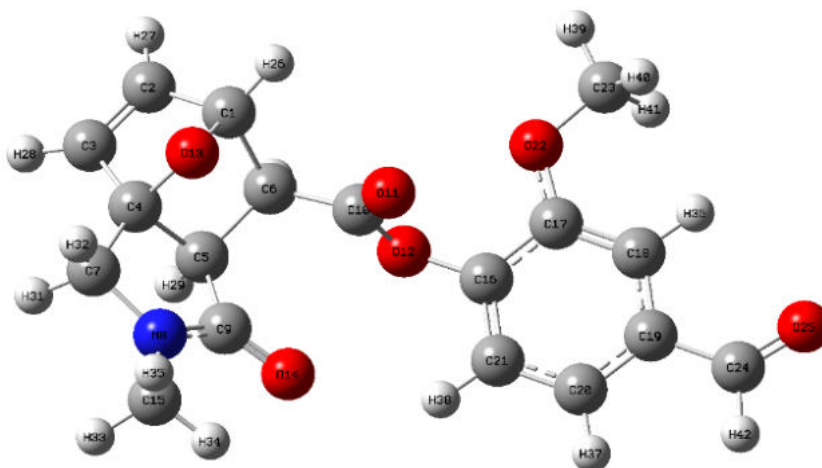


Рисунок 1 – Оптимизированная молекула методом РМ6

Рассчитанный электронный спектр поглощения молекулы

Таблица 1

Состояние	Длина волны, нм	Энергия перехода, эВ	Разложение волновых функций по однократно возбужденной конфигурации	Сила осциллятора (f)
$S_0 \rightarrow S_2$	304.35	4.0737	0.10301(87 → 91)+0.10464(87 → 92)+0.68672(90 → 91)	0.2105
$S_0 \rightarrow S_3$	257.70	4.8112	0.66532(87 → 91)+0.10046(89 → 91)-0.11635(90 → 91)-0.14562(90 → 92)	0.3754
$S_0 \rightarrow S_7$	219.47	5.6491	0.13184(87 → 91)0.61819(90 → 92)-0.20451(90 → 94)	0.3455
$S_0 \rightarrow S_8$	216.56	5.7253	0.13269(83 → 94)-0.11387(87 → 94)+0.19270(90 → 92)+0.35953(90 → 93)+0.48655(90 → 94)	0.1864
$S_0 \rightarrow S_{16}$	200.21	6.1926	0.15805(85 → 93)-0.17089(87 → 92)-0.16990(88 → 93)+0.26110(88 → 94)-0.14722(88 → 95)-0.26234(89 → 92)+0.13495(89 → 93)+0.44222(89 → 94)	0.1813
$S_0 \rightarrow S_{17}$	199.14	6.2258	0.53039(87 → 92)+0.17171(87 → 93)+0.15418(88 → 94)+0.10154(89 → 94)+0.11418(90 → 92)+0.25268(90 → 96)	0.2660

Первая широкая и интенсивная полоса поглощения с максимумом при 257.70 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 четырех функций: 87 → 91, 89 → 91, 90 → 91, 90 → 92. Возбуждение электрона с 87 молекулярной орбитали (МО) на нижнюю вакантную молекулярную орбиталь 91 дает главный вклад в полосу поглощения при 257.70 нм (табл. 1, рис. 3,4).

Вторая интенсивная полоса поглощения с максимумом при 219.47 нм относится к переходу в возбужденное синглетное состояние молекулы ($S_0 \rightarrow S_7$). Расчеты показывают, что данное возбужденное состояние описывается волновой функцией, отвечающей наложению трех функций: 87 → 91, 90 → 92, 90 → 94. Возбуждение электрона с 90 МО на 92 МО дает главный вклад в полосу поглощения при 219.47 нм (табл. 1, рис. 3). Остальные переходы имеют маленькое значение f и запрещены по симметрии.

Теоретический спектр поглощения оптимизированной молекулы в среде растворителя (вода) рассчитан с помощью программного пакета Gaussian 16, используя уровень теории M06/TZVP. Усредненный масштабирующий коэффициент программы при расчете УФ спектров равен 0.99. Рассчитанный электронный спектр поглощения молекулы в среде растворителя представлен на рисунке 3.

Анализ волновой функции показал, что значения энергии составили: HOMO = -7.01 eV, LUMO = -1.93 eV. Из этого следует, что ширина запрещенной зоны составляет = 5.08 eV (Рисунок 2).

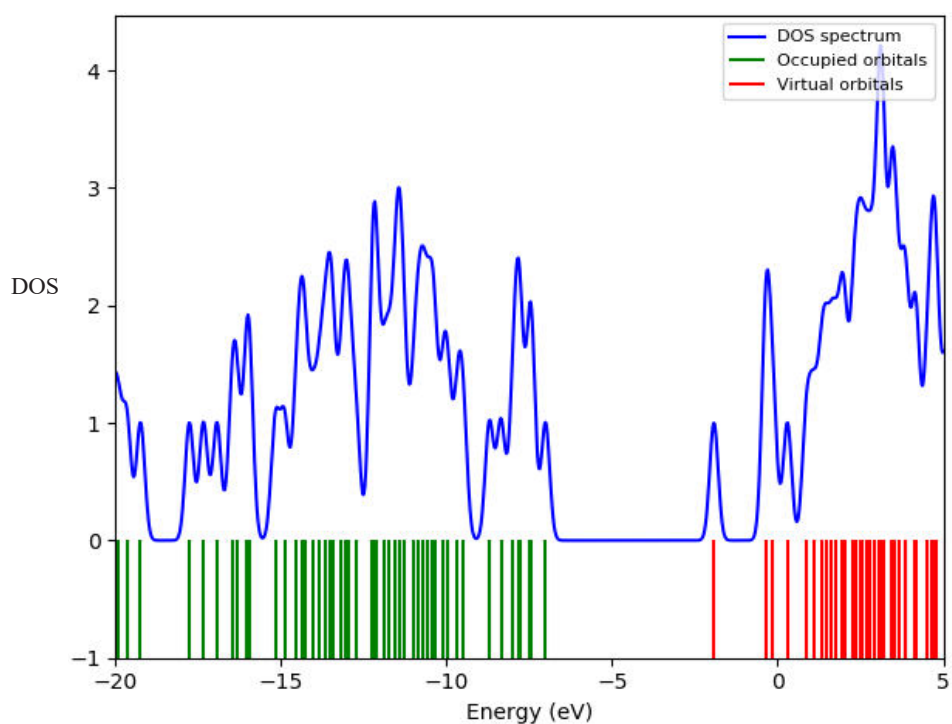


Рисунок 2 – Рассчитанный график суммарных электронных плотностей (DOS) состояний молекулы

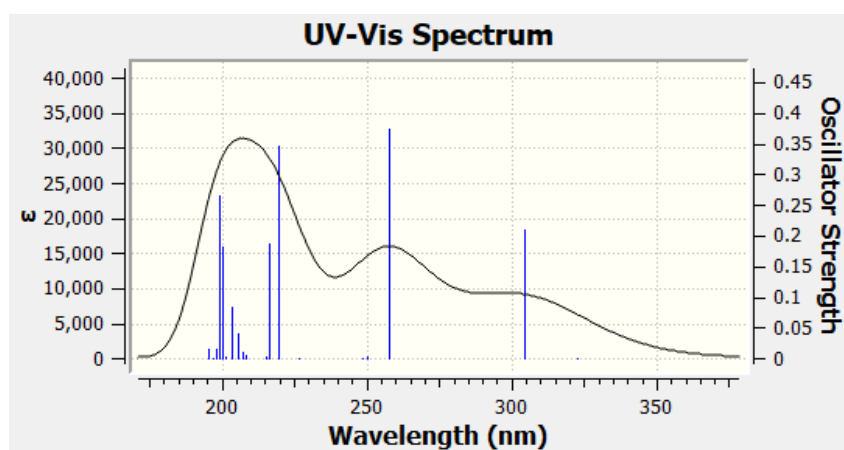
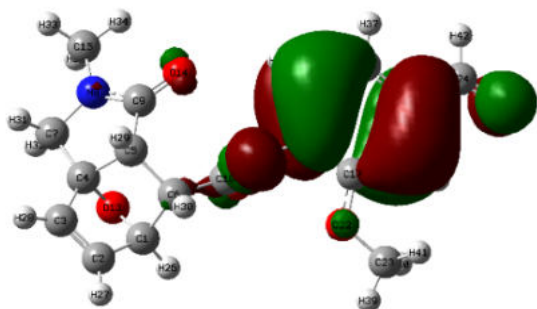
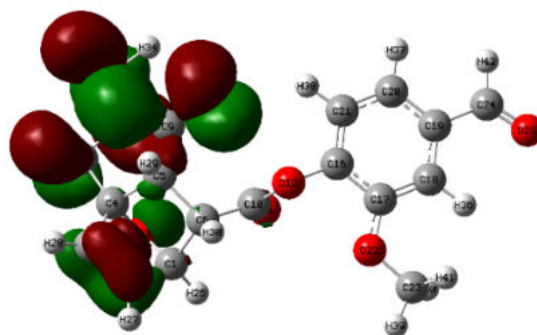


Рисунок 3 – Спектр поглощения молекулы

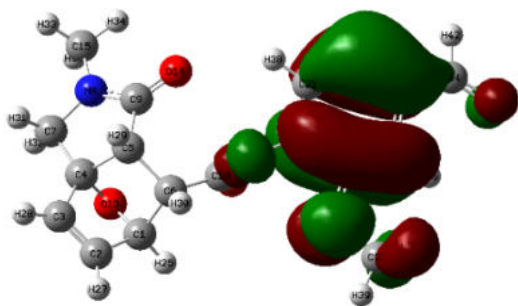
НОМО-3 (87)



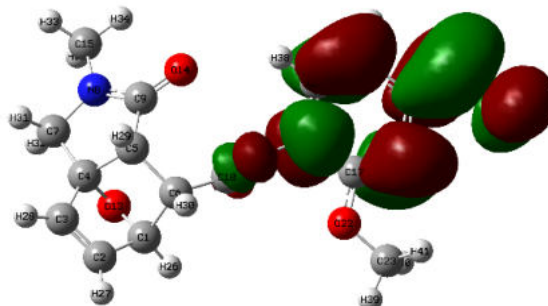
НОМО-1 (89)



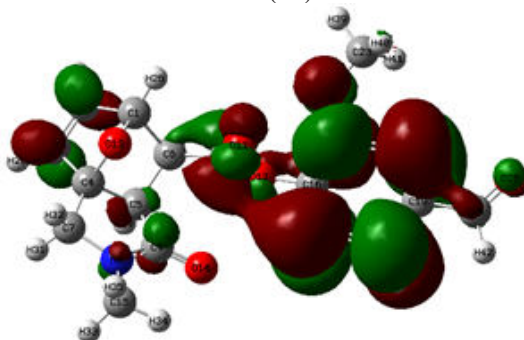
HOMO (90)



LUMO (91)



LUMO+1 (92)



ЛИТЕРАТУРА

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 [et al.] // Journal of Molecular Structure. – 2017. – Vol. 1. – No. 1146. – P. 881–888.
2. Shahab, S., Almodarresiyeh, H.A., Sheikhi, M., Ihnatovich, Z., Filippovich, L. Density Functional Theory Investigation, Bioactivity, Absorption, Distribution, Metabolism, and Excretion Properties, Docking and in Silico Analysis of New Effective Piperazine Derivatives against Alzheimer's Disease. Russian Journal of Physical Chemistry B., 2023, 17(3), P. 725–737.

ТРОФИЧЕСКАЯ ФУНКЦИЯ В ОЗЕРНОЙ ЭКОСИСТЕМЕ. KDD-ПОДХОД TROPHIC FUNCTION IN THE LAKE ECOSYSTEM. KDD APPROACH

**Н. С. Минаев¹, Н. И. Нуриева¹, Б. В. Адамович^{1,2}, А. Б. Медвинский¹
N. S. Minaev¹, N. I. Nurieva¹, B. V. Adamovich^{1,2}, A. B. Medvinsky¹**

¹Институт теоретической и экспериментальной биофизики РАН, г. Пущино, Россия

²Белорусский государственный университет, г. Минск, Беларусь,
nailya.nurieva@mail.ru

¹Institute of theoretical and experimental biophysics RAS, Pushchino, Russia

²Belarusian State University, Minsk, Belarus

Адекватность результатов моделирования экологических процессов во многом определяется выбором математической функции, описывающей трофические взаимодействия. Здесь мы представляем результаты сравнения широкого спектра трофических функций, которые используются при моделировании трофических взаимодействий, с трофической функцией, характерной для взаимодействий между популяциями фитопланктона и зоопланктона в экосистеме Нарочанских озер (Беларусь). Мы применяем KDD-подход, который позволяет нам использовать результаты мониторинга экосистемы Нарочанских озер для определения временных рядов трофических функций в каждом из водоемов этой экосистемы. KDD-подход предусматривает прямой ввод данных мониторинга в математическое описание динамики популяции. Показано, что трофические функции, зависящие, в том числе, от плотности популяции хищника, лучше соответствуют экологическим процессам в Нарочанских озерах, чем трофические функции, зависящие только от плотности жертвы.