

Рисунок 3 – Электронный спектр поглощения молекулы

Теоретический спектр поглощения оптимизированной молекулы в вакууме рассчитан с помощью программного пакета Gaussian 09W. Усредненный масштабирующий коэффициент программы при расчете УФ спектров равен 0.99. Рассчитанный электронный спектр поглощения представлен на рисунке 3.

**Выводы.** Неэмпирическим методом САМ-В3-LYP проведены квантово-химическое моделирование 1Н-индол-3-илгидрогенсульфата и рассчитан электронный спектр молекулы в вакууме. Установлено, что самая интенсивное поглощение наблюдается при длине волны 173.69 нм. Ширина запрещенной зоны соединения составляет 0.26575 eV, что свидетельствует о высокой биологической активности данной молекулы.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Shahab, S. Polarization, excited states, trans-cis properties and in PVA matrix / S. Shahab, L. Filippovich, M. Sheikhi, R. Kumar, E. Dikumar, H. anisotropy of thermal and electrical conductivity of the 4- (phenyldiazanyl)aniline Yahyaei, A. Muravsky // J. Mol. Struct. - 2017. - P. 1141.
2. Shahab, S. Synthesis, geometry optimization, spectroscopic investigations (UV/Vis, excited states, FT-IR) and application of new azomethine dyes / S. Shahab [et al.] // J. of Molecular Structure.— 2017. — Vol. 1148. — P. 134-149.
3. 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.
4. 2. Shahab, S., Sheikhi, M., Filippovich, L., Dikumar, E., Pazniak, A., Rouhani, M., & Kumar, R. (2019). Molecular Investigations of the Newly Synthesized Azomethines as Antioxidants: Theoretical and Experimental Studies. *Current molecular medicine*, 19(6), 419-433.
5. Sheikhi, M., Shahab, S., Filippovich, L., Khaleghian, M, Dikumar; 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.

## КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ, ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА И БИОЛОГИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ РИБАВИРИНА QUANTUM-CHEMICAL MODELING, ELECTRONIC STRUCTURE AND BIOLOGICAL ACTIVITY OF RIBAVIRIN

**Д. Ф. Бурло, С. Н. Шахаб**  
**D. F. Burlo, S. N. Shahab**

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

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

В настоящей работе проведено квантово-химическое моделирование 1-β-D-рибофуранозил-1,2,4-триазол-3-карбоксамид в газовой фазе и в состоянии сольватации водой с помощью неэмпирического метода RHF. Исследована электронная структура соединения. Рассчитаны электронные свойства, такие как  $E_{\text{HOMO}}$  и  $E_{\text{LUMO}}$ , получены спектральные и термодинамические характеристики для обоих состояний, а также ширина запрещенной зоны как основной параметр биологической активности органических соединений.

In this work, quantum-chemical modeling of 1-β-D-ribofuranosyl-1,2,4-triazole-3-carboxamide in the gas phase and in the state of solvation with water using the nonempirical RHF method was carried out. The electronic structure of the compound is investigated. Electronic properties such as  $E_{\text{HOMO}}$  and  $E_{\text{LUMO}}$  are calculated, spectral and thermodynamic characteristics for both states are obtained, as well as the band gap width as the main parameter of the biological activity of organic compounds.

*Ключевые слова:* квантово-химическое моделирование, электронная структура, биологическая активность, HOMO, LUMO.

*Keywords:* quantum chemical modeling, electronic structure, biological activity, HOMO, LUMO.

<https://doi.org/10.46646/SAKH-2024-1-309-312>

Одними из наиболее эффективных методов химических исследований являются квантово-химическое моделирование пространственного и электронного строения, физико-химических и химических свойств различных по изученности атомно-молекулярных структур и их объединений [1, 3, 4].

Информативность квантово-химических расчетов значительно выше в сравнении с экспериментальными методами изучения строения молекул. В нескольких расчетах можно получить сведения о геометрии молекулы, термодинамических функциях состояния, энергиях ионизации, дипольном моменте, распределении электронной плотности, электронном спектре и т.п. На данный момент ни один из экспериментальных методов не позволяет получить более полного набора данных. К тому же, некоторые рассчитываемые свойства молекул и их объединений (свободные ковалентности, порядки связей, свойства молекул, свойства переходных состояний) невозможно определить экспериментальными методами, однако они являются важными для описания поведения молекул в химических реакциях [1, 2].

Рибавирин является противовирусным препаратом для лечения тяжелой инфекции, вызванной респираторно-синцициальным вирусом, вирусным гепатитом С, геморрагической лихорадкой Крым-Конго, а также других вирусных инфекций. Изучение его влияния, пространственного строения, физических и химических свойств может быть полезно для создания новых биологически активных веществ, лекарственных препаратов, при разработке которых непременно используется молекулярное моделирование.

Использовался персональный компьютер AMD Ryzen 7 3700U (процессор с частотой 2.30 GHz) с операционной системой Windows 10. Первоначальная оптимизация геометрии заданного соединения была выполнена с использованием Gaussian 09W. Для всех расчетов ab initio использовался метод Гаусса 16. Молекулярные свойства соединения были рассчитаны на теоретическом уровне HF/6-311+G\*\*. Структуры с наименьшей энергией были вычислены с помощью конформационного анализа. Оптимизация геометрии была выполнена методом HF с тем же базовым набором. Оптимизация геометрии была выполнена в газовой фазе и в гидратированном состоянии. Оптимизированные молекулярные структуры, поверхности HOMO и LUMO были визуализированы с помощью программы GaussView 5.0.

Найдена равновесная геометрическая структура молекулы 1-β-D-рибофуранозил-1,2,4-триазол-3-карбоксамид и, таким образом, была оптимизирована геометрия молекулы.

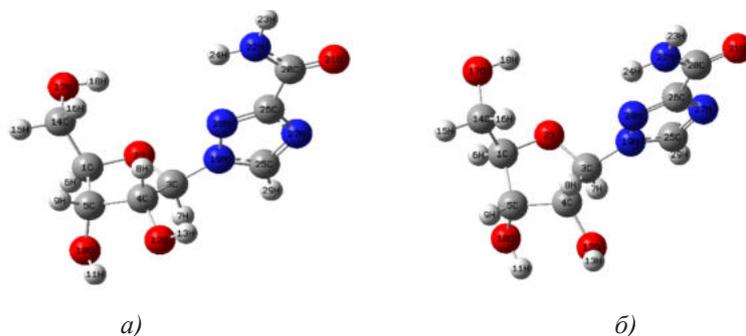


Рисунок 1 – Оптимизированные структуры:  
а) рибавирин в газовой фазе; б) рибавирин в состоянии сольватации водой

Также in silico методом RHF с базисным набором 6-311+G\*\* были рассчитаны спектральные характеристики (УФ-спектр) рибавирина в газовой фазе.

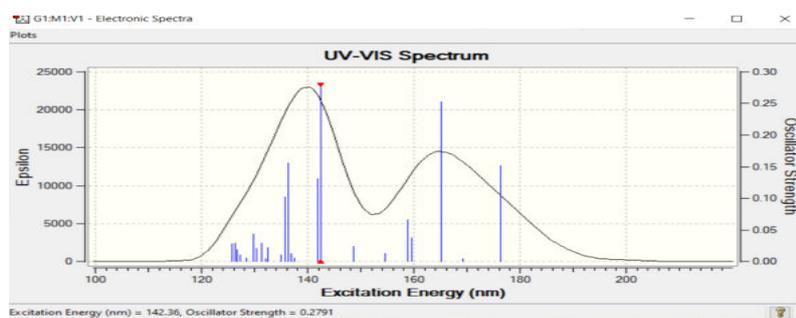


Рисунок 2 – Ультрафиолетовый спектр рибавирина, рассчитанный HF/6-311+G\*\*

Таблица 1

Электронные переходы при UV-VIS для рибавирина в газовой фазе

Длина волны, нм	Энергия перехода, эВ	Разложение волновых функций по однократно возбужденной конфигурации	Сила осциллятора, (f)
176.17	7.0379	-0.14260 (62 → 69) + 0.48613 (64 → 69) - 0.16244 (64 → 70) + 0.16972 (64 → 71) - 0.23590 (64 → 72)	0.1519
165.01	7.5135	-0.29020 (62 → 69) + 0.11636 (62 → 72) + 0.36160 (63 → 69) - 0.11944 (63 → 70) + 0.12783 (63 → 71) - 0.17523 (63 → 72) - 0.15248 (64 → 69) - 0.11037 (64 → 84)	0.2526
142.36	8.7089	0.20276 (62 → 65) + 0.12936 (62 → 66) - 0.14612 (63 → 65) + 0.11239 (64 → 71) - 0.26313 (64 → 72) + 0.11180 (64 → 73) - 0.14181 (64 → 76) + 0.10530 (64 → 77) + 0.13403 (64 → 79) + 0.17303 (64 → 81) - 0.18465 (64 → 84)	0.2791
141.79	8.7441	0.11550 (55 → 65) + 0.12380 (58 → 65) - 0.10878 (59 → 65) + 0.28072 (62 → 65) + 0.12645 (62 → 66) - 0.11249 (62 → 69) - 0.15928 (63 → 65) - 0.10656 (63 → 66) + 0.13745 (64 → 67) + 0.15585 (64 → 68) + 0.16784 (64 → 72) - 0.12753 (64 → 73) - 0.11375 (64 → 77) + 0.10946 (64 → 84)	0.1310

Как видно из рисунка 2 и таблицы 1, широкая и сильная полоса поглощения с максимумом при 142.36 нм относится к переходу в возбужденное синглетное состояние ( $S_2$ ). Расчеты показали, что это возбужденное состояние описывается волновой функцией, соответствующей суперпозиции одиннадцати конфигураций для одноэлектронных возбуждений ((62 → 65), (62 → 66), (63 → 65), (64 → 71), (64 → 72), (64 → 73), (64 → 76), (64 → 77), (64 → 79), (64 → 81), (64 → 84)).

Также в результате компьютерного моделирования были получены спектральные характеристики (УФ-спектр) рибавирина, сольватированного водой.

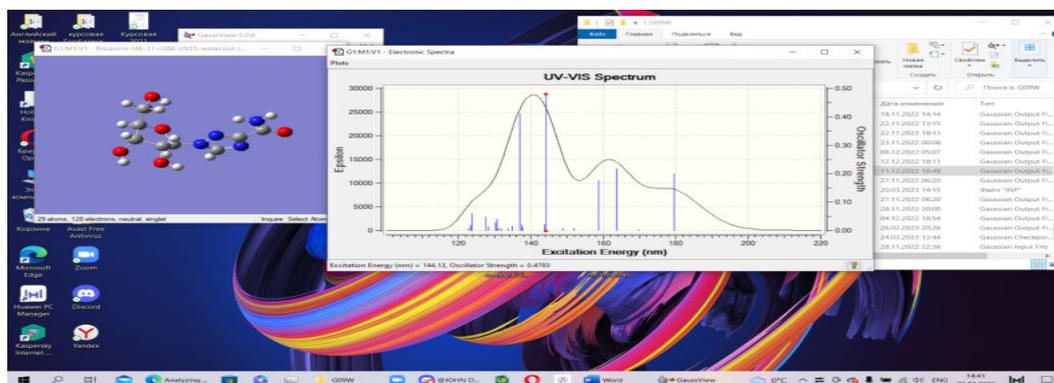


Рисунок 3 – Ультрафиолетовый спектр рибавирина, рассчитанный HF/6-311+G\*\*

Электронные переходы при UV-VIS для рибавирина, сольватированного водой

Длина волны, нм	Энергия перехода, эВ	Разложение волновых функций по однократно возбужденной конфигурации	Сила осциллятора, ( <i>f</i> )
179.64	6.9017	0.19960 (64 → 67) + 0.59249 (64 → 69) - 0.10252 (64 → 72)	0.1991
163.78	7.5700	0.10288 (59 → 69) + 0.10155 (60 → 69) - 0.18412 (61 → 69) + 0.17440 (63 → 67) + 0.51161 (63 → 69)	0.2174
158.78	7.8084	0.11651 (61 → 69) + 0.15928 (62 → 67) + 0.52988 (62 → 69) - 0.13101 (62 → 72) + 0.10735 (63 → 69)	0.1757
144.13	8.6021	-0.13150 (63 → 69) + 0.10364 (64 → 65) + 0.18800 (64 → 67) - 0.12609 (64 → 69) + 0.28617 (64 → 72) - 0.10595 (64 → 74) + 0.11421 (64 → 75) - 0.19300 (64 → 76) - 0.18886 (64 → 79) + 0.17459 (64 → 81) - 0.17138 (64 → 82) + 0.13924 (64 → 84)	0.4783
136.97	9.0517	0.11311 (61 → 69) + 0.13280 (62 → 69) - 0.10630 (63 → 69) + 0.16059 (63 → 72) - 0.10047 (63 → 74) - 0.16008 (63 → 76) - 0.18547 (63 → 79) + 0.15749 (63 → 81) - 0.15344 (63 → 82) + 0.13312 (63 → 84) + 0.17732 (64 → 67) + 0.11138 (64 → 72)	0.4125

Как видно из рисунка 3, а также таблицы 2, первая широкая и интенсивная полоса поглощения с максимумом при 144.13 нм относится к переходу в первое возбужденное синглетное состояние молекулы ( $S_2$ ). Расчеты показывают, что данное возбужденное состояние описывается волновой функцией, соответствующей суперпозиции двенадцати конфигураций для одноэлектронных возбуждений ((63 → 69) (64 → 65) (64 → 67) (64 → 69) (64 → 72) (64 → 74) (64 → 75) (64 → 76) (64 → 79) (64 → 81) (64 → 82) (64 → 84)).

Подробная информация о квантово-молекулярных дескрипторах названных соединений, таких как потенциал ионизации (IP) и сродство к электрону (EA), твердость ( $\eta$ ), мягкость (S), электроотрицательность ( $\mu$ ), электрофильный индекс ( $\omega$ ), способность отдавать электроны ( $\omega^-$ ), способность принимать электроны ( $\omega^+$ ) и энергетический разрыв ( $E_g$ ) были рассчитаны. Были исследованы фармакокинетические свойства названных соединений и их биологическая активность.

Далее приведены результаты расчета электронных свойств:

Таблица 3

Электронные свойства рибавирина рассчитанные с помощью уровня теории HF/6-311+G\*\* и выраженные в эВ

Structures	IP	EA	$\eta$	S	$\mu$	$\omega$	$\omega^+$	$\omega^-$	$E_g$
RBV (in gas)	0,4036	-0,0471	0,2253	0,1127	0,1782	0,0705	0,0095	0,1878	0,4507
RBV (hydrated)	0,3981	-0,0641	0,2311	0,1156	0,1670	0,0603	0,0057	0,1727	0,4622

Энергия НОМО напрямую связана с потенциалом ионизации (IP), в то время как энергия LUMO связана со сродством к электрону (EA).

Как видно из таблицы 3, значение  $E_g$  для рибавирина (0,4507 эВ) является низким. Таким образом, эта структура может хорошо действовать как антиоксидант.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Бутырская, Е.В. Компьютерная химия: основы теории и работа с программами Gaussian и GaussView: учеб. пособие / Е.В. Бутырская // Основы работы с программой Gaussian под WINDOWS / Е.В. Бутырская. – М., 2011. – Гл. 6. – С. 100 – 133.
2. Yaroschuk, O. Light induced structures in liquid crystalline side-chain polymers with azobenzene functional groups / O. Yaroschuk [Et al.] // J. Chem. Phys. – 2001. – № 114. – С. 5330–5336.
3. Masoud M. S. Solvatochromic behavior of the electronic absorption spectra of some azo derivatives of amino pyridines / M. S. Masoud [Et al.] // J. Spectorochim. Acta. – 2004. – № 60. – С. 3155–3159
4. Электронная структура и абсорбционный спектр натрий 2-гидрокси-5- ((2-метокси-4((4-сульфофенил)дiazенил)фенил)дiazенил) бензоата / Х. А. Алмодарресие [и др.] // Журнал прикладной спектроскопии. – 2014 – Т. 81, №1 – С. 181-183.