КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ, УФ СПЕКТР, ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА И БИОЛОГИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ ГЛИЦИЛГЛИЦИЛЛИЗИНА

М. В. Петров[1)], **С. Н. Шахаб**[1)]

[1)]*Учреждение образования «Международный государственный экологический институт имени А. Д. Сахарова» Белорусского государственного университета, ул. Долгобродская, 23/1, 220070, г. Минск, Беларусь, siyamakshahab@mail.ru*

В данной работе представлены результаты квантово-химического моделирования глицилглицилглицилизина с использованием неэмпирического метода Хартри-Фока (HF) и базиса 6-31G*. Определена электронная структура вещества, рассчитаны электронные свойства, такие как потенциал ионизации, сродство к электрону, жесткость, мягкость, электроотрицательность, электрофильный индекс, способность отдавать электроны, способность принимать электроны и ширина запрещенной зоны.

Ключевые слова: Квантово-химическое моделирование; УФ спектр; HF.

QUANTUM CHEMICAL MODELING, UV SPECTRUM, ELECTRONIC STRUCTURE AND BIOLOGICAL ACTIVITY OF GLYCYLGLYCILLISIN

M. V. Petrov[1)], **S. N. Shahab**[1)]

[1)] *International Sakharov Environmental Institute of Belarusian State University, Dolgobrodskaya str., 23/1, 220070, Minsk, Belarus, siyamakshahab@mail.ru*

This paper presents the results of quantum chemical modeling of glycylglycyl lysine using the Hartree-Fock (HF) nonempirical method and the 6-31G* basis. The electronic structure of a substance is determined, electronic properties such as ionization potential, electron affinity, hardness, softness, electronegativity, electrophilic index, ability to donate electrons, ability to accept electrons, and band gap are calculated.

Keywords: Quantum chemical modeling; UV spectrum; HF.

https://doi.org/10.46646/SAKH-2025-1-351-354

Цель исследования: определить электронную структуру и биологическую активность, рассчитать УФ спектр глицилглицилглицилизина.

Методы и материалы исследования: Для выполнения расчетов использован персональный компьютер с процессором IntelCorei7 8550U (3,6 GHz CPU) с оперативной системой Windows 10. Полная оптимизация молекулы проведена с использованием программного пакета Gaussian 09W. Оптимизированная молекулярная структура, поверхности HOMO и LUMO орбиталей, а также спектр поглощения визуализированы в программе GaussView 5.0.

Для решения определенных задач в квантовой химии часто применяют методы Хартри-Фока (HF) и теории функционала плотности (DFT) [2].

Полная оптимизация молекулы с определением минимума энергии и расчет электронной структуры молекулы проведены неэмпирическим методом HF в базисе 6-31G* в вакуумной среде (рисунок 1). Энергия глицилглицилглицилизина при такой конформации составляет -907,616 кДж/моль, что говорит о высокой термодинамической стабильности.

Рис 1. Оптимизированная структура глицилглициллизина

Электронный спектр молекулы рассчитан для 15 одноэлектронных возбуждений. Результаты расчёта электронного спектра представлены в таблице 1.

Таблица 1

Рассчитанный электронный спектр молекулы

Состояние	Длина волны, нм	Энергия перехода, eV	Разложение волновых функций по однократно возбужденной конфигурации	Сила осциллятора (f)
S0→S4	144.74	8.5659	-0.14402(63→72)-0.27849(68→72)+ 0.23571(68→74)+ 0.10936(68→75)+ 0.40670(69→72)+0.22403(69→73)	0.1552
S0→S6	142.52	8.6992	0.10141(63→72)+0.26454(68→72)+ 0.18363(68→73)+0.12488(68→74)+ 0.21789(69→73)+0.44305(69→74)+ 0.12679(69→75)	0.1326
S0→S9	133.86	9.2621	0.21469(59→71)-0.12685(59→73)+0.24420(60→71)- 0.15402(60→73)+0.25419(61→71)+0.10250(61→72)- 0.17794(61→73)-0.13134(64→71)-0.11503(65→71)+ 0.15228(67→71)-0.19988(68→71)-0.15425(69→73)	0.1172
S0→S15	117.96	10.5105	0.13993(57→72)+0.10975(65→72)+ 0.10825(65→73)+ 0.16752(66 → 72)- 0.14146(67→72)+0.27309(68 →72)+0.10171(68→73)- 0.22408(68→74)+0.29716(69→72) -0.23518(69→74)- 0.10965 (69 → 75)	0.1368

Первая широкая и наиболее интенсивная полоса поглощения с максимумом при 144,74 нм относится к переходу в возбужденное синглетное состояние молекулы S0→S4. Данное возбужденное состояние описывается волновой функцией, отвечающей наложению шести функций 63→72, 68→72, 68→74, 68→75, 69→72, 69→73. Возбуждение электрона с 69 молекулярной орбитали, на вакантную молекулярную орбиталь 72 вносит наибольший вклад в полосу поглощения.

Вторая по интенсивности полоса поглощения с максимумом при 117,96 нм относится к переходу в возбужденное синглетное состояние молекулы S0→S15. Данное возбужденное состояние описывается волновой функцией, отвечающей наложению 11 функций 57→72, 65→72, 65→73, 66 → 72, 67→72, 68 →72, 68→73, 68→74, 69→72, 69→74, 69 → 75. Возбуждение электрона с 69 молекулярной орбитали, на вакантную молекулярную орбиталь 72 вносит наибольший вклад в полосу поглощения. Остальные переходы имеют малое значение f и запрещены по симметрии.

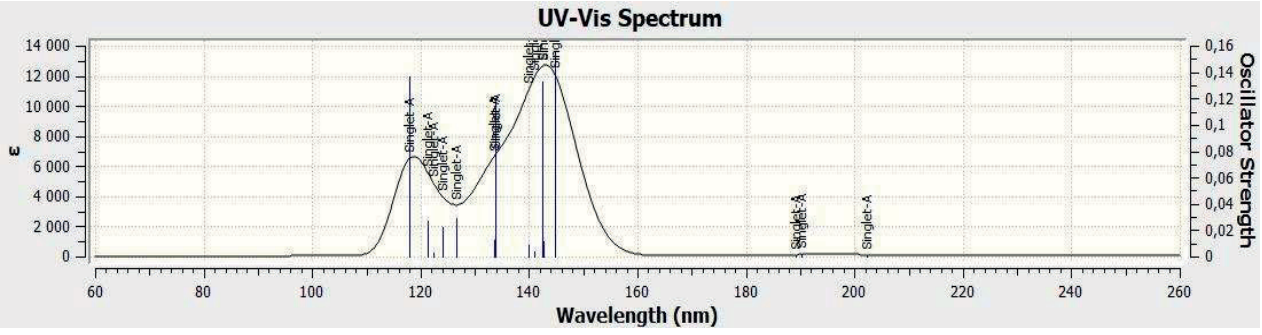
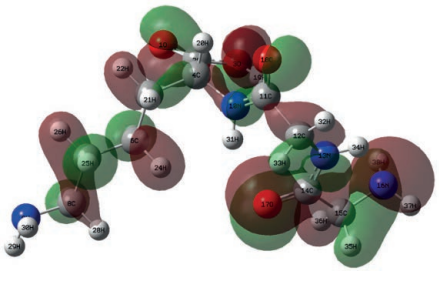
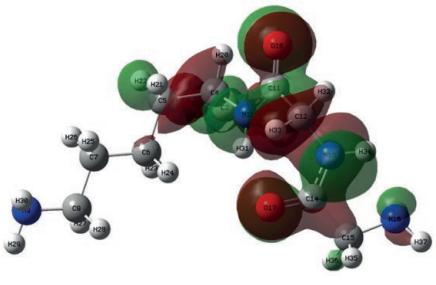


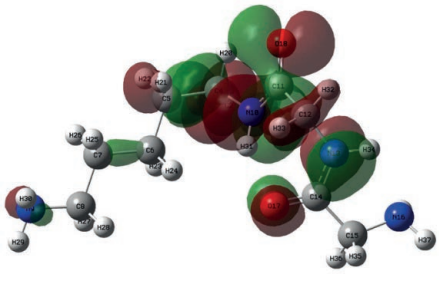
Рис. 3. Ультрафиолетовый спектр в вакууме



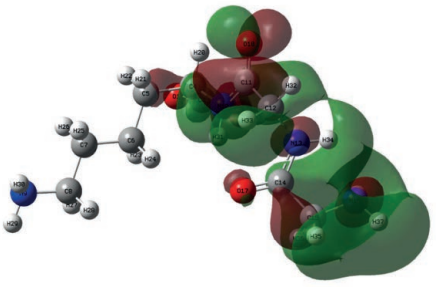
HOMO-7 (63)



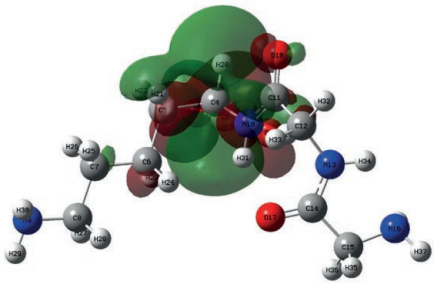
HOMO-2 (68)



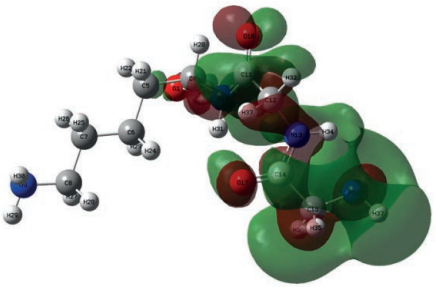
HOMO-1 (69)



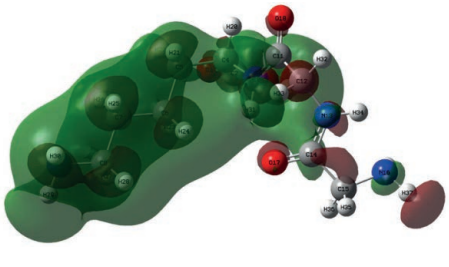
LUMO+1 (72)



LUMO+2 (73)



LUMO+3 (74)



LUMO+4 (75)

Рис. 3. Молекулярные орбитали, участвующие в спектре поглощения при 144,74 нм

Для изучения электронных свойств глицилглициллизина рассчитаны ширина запрещенной зоны (Eg) потенциал ионизации (IP) и сродство к электрону (EA), твердость (η), мягкость (S), электроотрицательность (μ), электрофильный индекс (ω), способность отдавать электроны (ω^-) и способность принимать электроны (ω^+), представленные в таблице 2.

Таблица 2

Электронные свойства глицилглициллизина

Eg, eV	IP, eV	EA, eV	η, eV	S, eV	μ, eV	ω, eV	ω^-, eV	ω^+, eV
0.5419	0.37975	-0.16215	0.27095	1.845359	0.1088	0.021844	0.001313	0.110113

Показатель E_g, является основным параметром, указывающим на степень биологической активности, определяется как $E_g = E_{LUMO} – E_{HOMO}$, и составляет 0.5419 eV, что указывает на высокую биологическую и антиоксидантную активность молекулы [1].

Заключение. Используя неэмпирический метод HF/6-31G*, выполнена полная оптимизация молекулы, рассчитаны спектр поглощения и электронные свойства молекулы. Установлено, что наиболее интенсивное поглощение происходит при длине волны 144,74 нм, ширина запрещенной зоны составляет 0.5419 eV, что указывает на высокую биологическую и антиоксидантную активность.

Библиографические ссылки

1. 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, MEPand HOMO-LUMO investigations / S. Shahab [at all] // Journal of Molecular Structure. – 2017. Vol. 1. No. 1146. P. 881–888.

2. *Sheikhi M.* New derivatives of (E,E)-azomethines: design, quantum chemical modeling, spectroscopic (FTIR, UV/Vis, polarization) studies, synthesis and their applications: experimental and theoretical investigations // J. of Molecular Structure. 2018. Vol. 1152. P. 368–385.