

Квантово-химическое моделирование
трехкомпонентной системы цисплатин–
фуллеренол–хинин

Дикусар Е. А.,

Пушкарчук А. Л.,

Безъязычная Т. В.,

Акишина Е. А.,

Солдатов А. Г.,

Кутень С. А.,

Ермак Д. В.,

Пивоварчик Т. С.,

Мигас Д. Б.¹,

Стёпин С. Г.,

Низовцев А. П.,

Килин С. Я.,

Кульчицкий В. А.,

Мукушева Г. К.,

Алиева М. Р.,

Поткин В. И.

¹Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, 220013, Минск, ул. П. Бровки, 6

Ключевые слова: хинин, фуллеренол, цисплатин, квантово-химическое моделирование, диаграммы энергий высших занятых и нижних вакантных молекулярных орбиталей, трехкомпонентная система, аддукт, молекулярный ансамбль, синергизм, химиотерапия.

Аннотация: Методом квантово-химического моделирования с уровнем теории Хартри–Фока HF-3c/MINIS/MINIS11(d)(Cl)/def2-SV(P)ECP(Pt), учитывающим межмолекулярное взаимодействие, с использованием программного пакета ORCA 5.03 изучено электронное строение и энергия связывания аддуктов цисплатина, хинина и фуллеренола и их трехкомпонентных систем. Путем анализа полных энергий систем и расчетных диаграмм энергий высших занятых и нижних вакантных молекулярных орбиталей как исходных компонентов, так и образуемых ими молекулярных ансамблей определены наиболее вероятные по устойчивости их сочетания. Выявлены особенности синергетических эффектов и намечены перспективы использования трехкомпонентной системы цисплатин–хинин–фуллеренол C₆₀(OH)₂₄ при проведении химиотерапии в онкологической практике.

Источник публикации: Квантово-химическое моделирование трехкомпонентной системы цисплатин–фуллеренол–хинин = Quantum Chemical Modeling of Three-Component System Cisplatin–Fullerenol–Quinine / Е. А. Дикусар, А. Л. Пушкарчук, Т. В. Безъязычная [и др.] // Журнал прикладной спектроскопии. – 2024. – №4(91). – С. 563 – 570.