

Квантово-химическое моделирование трехкомпонентной системы карбоплатин– фуллеренол–хинин и его производны

Е. А. Дикусар,
А. Л. Пушкарчук,
Е. А. Акишина,
А. Г. Солдатов,
С. А. Кутень,
Д. В. Ермак,
Т. С. Пивоварчик,¹
Д. Б. Мигас,¹
А. П. Низовцев,
С. Я. Килин,
В. А. Кульчицкий,
Г. К. Мукушева,
М. Р. Алиева,
Н. Zhou,
В. И. Поткин.

2025

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

Ключевые слова: Хинин, сложные эфиры хинина, фуллеренол, карбоплатин, 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/MINIS1+1(d)(Cl)/def2-SV(P)ECP(Pt), учитывающим межмолекулярное взаимодействие, с использованием программного пакета ORCA 5.03 изучено электронное строение и энергия связывания аддуктов карбоплатина,

фуллеренола, хинина и его сложных эфиров, а также 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 сделаны выводы о наиболее вероятных по устойчивости их сочетаниях. Выявлены особенности синергетических эффектов и намечены перспективы использования трехкомпонентной системы карбоплатин–фуллеренол $C_{60}(OH)_{24}$ –хинин (или сложные эфиры хинина) при проведении химиотерапии в онкологической практике.

Экспериментально установлено, что увеличение диаметра полусферических геометрических неоднородностей до 25 мм на поверхности поглотителя электромагнитного излучения приводит к увеличению значений коэффициентов отражения и передачи на 3–9 дБ. Показано, что поглотители электромагнитного излучения из полиуретановой мастики и активированного кокосового угля с полусферическими геометрическими неоднородностями диаметром 15 мм характеризуются коэффициентом отражения от минус 3,3 до минус 20,5 дБ, коэффициентом передачи от минус 4 до минус 16,1 дБ в диапазоне частот 2–17 ГГц. Полученные результаты позволяют рекомендовать использование углесодержащих поглотителей электромагнитного излучения с полусферическими геометрическими неоднородностями при конструировании безэховых камер и проведении измерений в СВЧ-диапазоне.

Источник публикации: Квантово-химическое моделирование трехкомпонентной системы карбоплатин–фуллеренол–хинин и его производны / Е. А. Дикусар, А. Л. Пушкарчук, Е. А. Акишина [и др.] // Журнал прикладной спектроскопии. –2025. – Т. 92, № 1. – С. 5–12.