

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

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

2025

<sup>1</sup>Белорусский 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 производные / Е. А. Дикусар, А. Л. Пушкарчук, Е. А. Акишина [и др.] // Журнал прикладной спектроскопии. – 2025. – Т. 92, № 1. – С. 5–12.