

Міністерство освіти і науки України
Північно-Східний науковий центр НАН України та МОН України
Національний університет
«Полтавська політехніка імені Юрія Кондратюка»

Тези

**75-ї наукової конференції професорів,
викладачів, наукових працівників,
аспірантів та студентів університету**

Том 2

02 травня – 25 травня 2023 р.

Полтава 2023

СЕКЦІЯ ХІМІЇ ТА ФІЗИКИ

УДК 544.653.3:546.78-31

*Соловійов В.В., д.х.н., проф.,
Усенко Д.В., PhD, MPhys, ст. викладач
Бунякіна Н.В., к.х.н., доц.,
Іванченко А.В. аспірантка
Яковенко Б.Д., студентка групи 101BT*

Національний університет «Полтавська політехніка імені Юрія Кондратюка»

ВИКОРИСТАННЯ ПРОГРАМНОГО КОМПЛЕКСУ GAMESS ПРИ ТЕОРЕТИЧНОМУ МОДЕЛЮВАННІ ДОСЛІДЖЕННЯ ФІЗИКО-ХІМІЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ НОВИХ ЛІКАРСЬКИХ ПРЕПАРАТІВ ДЛЯ ПРОФІЛАКТИКИ ТА ЛІКУВАННЯ ПОСТТРАВМАТИЧНИХ СТРЕСІВ В УМОВАХ ВІЙСЬКОВОГО СТАНУ

Посттравматичні стреси (ПТС) є серйозним психологічним захворюванням, що виникає внаслідок травматичного досвіду, такого як бойові дії. У разі військового стану, військовослужбовці і цивільні піддаються різним видам стресу, що може призвести до розвитку ПТС. Розробка нових лікарських препаратів для профілактики та лікування ПТС є важливим завданням, і використання сучасних обчислювальних інструментів, таких як програмний комплекс GAMESS може бути важливим підходом для вивчення їх фізико-хімічних властивостей.

GAMESS (General Atomic and Molecular Electronic Structure System) – це програмний комплекс, який широко використовується для розрахунку електронної структури та властивостей молекул та атомів. Він надає можливість використовувати безліч методів квантової теорії молекул (квантової хімії), включаючи методи HF (Hartree-Fock), DFT (Density Functional Theory), MP2 (Møller-Plesset perturbation theory of second order) та інші. Ці методи можуть бути застосовані для розрахунку різних фізико-хімічних властивостей молекул, таких як енергії, оптичні властивості, вібраційні спектри та інші.

З метою дослідження нових лікарських препаратів для профілактики та лікування ПТС може бути використаний програмний комплекс GAMESS для розрахунку різних фізико-хімічних властивостей, які є важливими для їх оптимізації. Наприклад, можна розрахувати енергетичні параметри молекул, такі як енергія зв'язку, іонізаційний потенціал, термодинамічна ентропія, заряди, спорідненість електронів та інші, щоб оцінити їх стабільність та реакційну активність. Також можна досліджувати оптичні властивості молекул, такі як енергії збудження, коефіцієнти екстинкції, флуоресцентні

властивості та інші, що може бути важливим для оцінки їх фотоактивності та здатності взаємодіяти з біологічними макромолекулами.

Одним із важливих аспектів дослідження лікарських препаратів є вивчення їхньої взаємодії з біологічними макромолекулами, такими як білки, нуклеїнові кислоти та інші. З використанням програмного комплексу GAMESS можна проводити розрахунки молекулярної взаємодії методами молекулярної механіки або квантової хімії, що дозволяє оцінити взаємодію лікарських препаратів з цільовими макромолекулами на атомарному рівні. Це може допомогти визначити, без проведення експерименту, ключові атоми та групи в молекулі препарату, які взаємодіють з біологічними макромолекулами, та внести відповідні модифікації для покращення їх фармакологічних властивостей.

Крім того, GAMESS підтримує широкий спектр методів, включаючи гібридні функціонали, багатоконфігураційні методи, квантово-хімічні методи з урахуванням сольватації, найбільшого наближення до умов людського організму та інші, що дозволяє досліджувати молекулярні системи з різними рівнями точності та складності. Це дає можливість більш детально та точно вивчати фізико-хімічні властивості лікарських препаратів в умовах воєнного стану, враховуючи особливості довкілля та взаємодії з іншими молекулами.

Застосування GAMESS у дослідженнях нових лікарських препаратів для профілактики та лікування посттравматичних стресів в умовах воєнного стану може мати важливе практичне значення. Програмний комплекс може допомогти у розробці більш ефективних та безпечних лікарських препаратів, оптимізації їх структури та властивостей, а також в оцінці їх взаємодії з біологічними макромолекулами та іншими молекулами в організмі. Це може сприяти розробці нових лікарських препаратів, які можуть бути використані в умовах воєнного стану для профілактики та лікуванню посттравматичних стресів у військовослужбовців та цивільного населення.

Висновок: Програмний комплекс GAMESS є потужним інструментом для дослідження фізико-хімічних властивостей нових лікарських препаратів для профілактики та лікування посттравматичних стресів в умовах військового стану. Завдяки широкому спектру підтримуваних методів та можливостей розрахунків, GAMESS дозволяє проводити детальні та точні дослідження молекулярних систем, оцінювати їх фізико-хімічні властивості, взаємодію з біологічними макромолекулами та процесами метаболізму.

Література

1. Sundriyal, V., Sosonkina, M., Liu, F., & Schmidt, M. W. (2011, May). *Dynamic frequency scaling and energy saving in quantum chemistry applications*. In *2011 IEEE International Symposium on Parallel and Distributed Processing Workshops and Phd Forum* (pp. 837-845). IEEE.
2. Alexeev, Y., P Mazanetz, M., Ichihara, O., & G Fedorov, D. (2012). *GAMESS as a free quantum-mechanical platform for drug research*. *Current topics in medicinal chemistry*, 12(18), 2013-2033.