

Оригинальные статьи

Научная статья

УДК 544.18

<https://doi.org/10.17308/kcmf.2024.26/12043>**Теоретическое исследование галогенированных производных антрацена: электронный и молекулярный аспект**Х. А. Осман^{1✉}, Ю. Х. Азиз², Р. А. Омер^{1,3}, Р. О. Карим²¹Университет Коя, факультет науки и здравоохранения, кафедра химии, Коя КОУ45, Курдистан, Ирак²Университет Халабджи, научный колледж, физический факультет, Халабджа 46018, Ирак³Факультет фармации, Фармацевтический колледж, Университет знаний, Эрбиль, 44001, Ирак**Аннотация**

В статье рассматриваются последствия галогенирования антрацена, одного из представителей полициклических ароматических углеводородов (ПАУ). С использованием метода теории функционала плотности (DFT) всесторонне исследован сложный характер взаимодействий между атомами галогена и молекулярной структурой антрацена. Взаимодействие галогенов, таких как фтор, хлор и бром, с ароматическими кольцами вызывает ряд изменений в электронной структуре, реакционной способности и оптических свойствах антрацена. Представленное исследование охватывает разнообразные аналитические аспекты и строится на основе анализа молекулярных орбиталей и плотности состояний, УФ- и оптической спектроскопии, ИК-спектроскопии, ЯМР-спектроскопии и натурального анализа заселенностей (NBO), раскрывая сложную картину молекулярных модификаций. Электронные переходы, вибрационные сигнатуры и смещения в спектрах ЯМР галогенированных производных антрацена отражают динамику модификаций, происходящих под воздействием галогенирования. В работе также рассматриваются перспективы использования галогенсодержащих производных антрацена в медицине, экологии и оптоэлектронике. В статье всесторонне освещаются как теоретический, так и практический аспект.

Ключевые слова: ПАУ, галогенирование, электронные свойства, DFT, энергетические состояния, частотный анализ**Благодарности:** авторы выражают благодарность руководителям химического отделения университета Коя за поддержку в проведении исследования.**Для цитирования:** Осман Х. А., Азиз Ю. Х., Омер Р. А., Карим Р. О. Теоретическое исследование галогенированных производных антрацена: электронный и молекулярный аспект. *Конденсированные среды и межфазные границы*. 2024;26(2): 280–294. <https://doi.org/10.17308/kcmf.2024.26/12043>**For citation:** Othman K. A., Azeez Y. H., Omer R. A., Kareem R. O. Theoretical exploration of halogenated anthracene derivatives: unraveling electronic and molecular insights. *Condensed Matter and Interphases*. 2024;26(2): 280–294. <https://doi.org/10.17308/kcmf.2024.26/12043>✉ Хдир Ахмед Осман, e-mail: aryan.qader@koyauniversity.org

© Осман Х. А., Азиз Ю. Х., Омер Р. А., Карим Р. О., 2024



Контент доступен под лицензией Creative Commons Attribution 4.0 License.

1. Введение

Антрацен, один из основных представителей полициклических ароматических углеводородов (ПАУ), состоит из конденсированных бензольных колец, вступающих друг с другом в сложные взаимодействия [1, 2]. В современных исследованиях большое внимание уделяется преобразующему воздействию галогенирования на молекулы антрацена. В частности, изучается воздействие таких галогенов, как фтор, хлор и бром, в результате взаимодействия с которыми антрацен приобретает новые свойства [3]. Галогенирование — это механизм, позволяющий модифицировать электронную структуру ПАУ и влиять на их реакционную способность. Процесс галогенирования оказывает воздействие на энергетические уровни соединений, спектры поглощения и спектры флуоресценции [4–6]. Исследования производных галогенированного антрацена ведутся в рамках самых разных научных направлений. В сфере медицины эти производные рассматриваются в качестве перспективных антибактериальных и противогрибковых средств, исследуются возможности их применения в рамках инновационных методов лечения рака и инфекционных заболеваний, а также в качестве компонентов современных систем доставки лекарственных средств [7–11]. Важность экологических исследований галогенированных ПАУ обусловлена тем, что, попадая в воздух, воду и почву, данные соединения оказывают существенное влияние на их профиль токсичности [12–14].

В данной работе представлены результаты вычислительного исследования влияния галогенирования на антрацен и его производные. Для анализа сложной структуры молекул данных соединений нами были использованы аналитические методы, такие как метод молекулярных орбиталей, оптическая спектроскопия, ИК-спектроскопия, ЯМР-спектроскопия, метод расчета карты потенциальной энергии и др. В работе рассматриваются перспективы использования исследуемых соединений в качестве лекарственных средств и уточняется электронная структура их молекул. Результаты исследования дополняют существующие на данный момент представления о галогенированных производных антрацена и их применениях.

2. Вычислительная процедура

В данном исследовании расчеты по методу теории функционала плотности (DFT) проводились с использованием программного пакета

Gaussian 09. Для оптимизации структуры молекул применялось приближение B3LYP с базисным набором 6-311G [15–18].

3. Результаты и обсуждение

Для графической репрезентации результатов расчета молекул антрацена и его производных, легированных фтором, хлором и бромом, использовалась программа GaussView. Затем для оптимизации структуры молекул применялся метод DFT с использованием базового набора B3LYP/6-311G, который позволяет учитывать конфигурации с низкой энергией (т. е. базового набора с наименьшей энергией [19–21]).

3.1. Молекулярные орбитали (МО) и анализ плотности состояний (ПС)

Анализ МО и ПС играет ключевую роль в понимании электронной структуры материала [22–24]. МО описывают распределение электронов внутри молекул, а анализ ПС даёт представление о распределении электронов в атоме по энергетическим уровням (рис. 1, 2). Энергетическая щель, примером которой является разница между энергиями высшей занятой молекулярной орбитали (HOMO) и низшей незанятой молекулярной орбитали (LUMO), существенно влияет на реакционную способность и оптические свойства материалов [25, 26]. Например, в случае с антраценом, легированным галогеном, зазор между HOMO и LUMO для нелегированной молекулы составляет 3.5785 эВ. При замещении

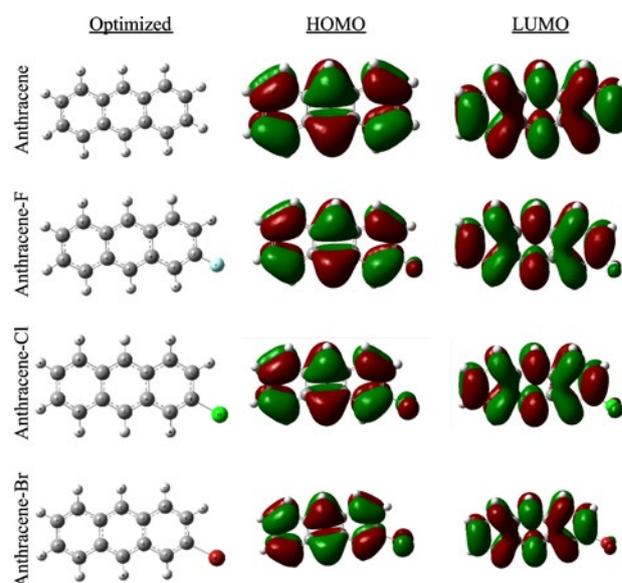


Рис. 1. Оптимизированные структуры и молекулярные орбитали антрацена и его структур, легированных галогенами

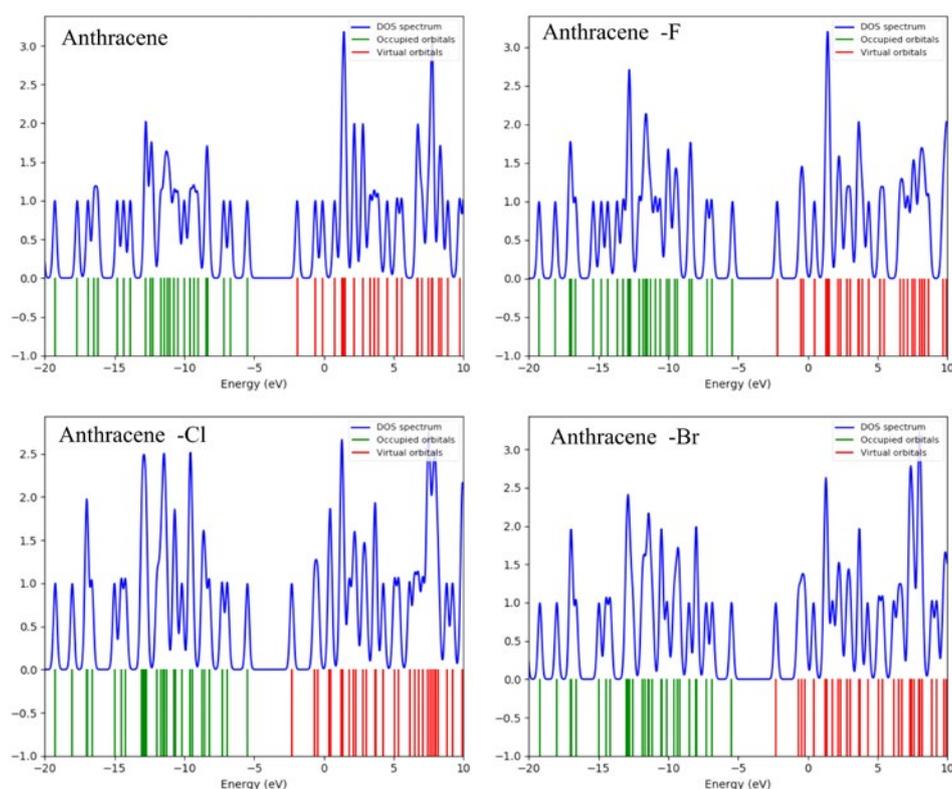


Рис. 2. Анализ плотности состояний антрацена и его галогенированных производных

фтором, хлором или бромом зазор уменьшается на 0.0069, 0.0224 и 0.0301 эВ соответственно за счет перераспределения электронов. Такого рода анализ МО, ПС и величины энергетической щели дает наиболее полное представление о характере электронных переходов, реакционной способности и оптических свойствах молекул и материалов [27, 28]. На рис. 2 показано, что структуры, легированные галогенами, имеют более высокую плотность состояний, чем чистый антрацен, что означает, что они имеют больше доступных электронных состояний на данном энергетическом уровне. Это может влиять на их электрические и оптические свойства.

Квантово-химические параметры антрацена и его галогензамещенных производных систематически изменяются в зависимости от размера атома галогена (табл. 1). Например, полная энергия соединений уменьшается с увеличением атома галогена [29] с -14684.7709 эВ для антрацена до -84714.4531 эВ для галогенированного антрацена, содержащего бром. Это связано с тем, что атомы галогенов имеют больше электронов. Легирование антрацена галогенами приводит к уменьшению E_{HOMO} и E_{LUMO} . Данный эффект обусловлен более высокой электроотрицательностью атомов галогена, приводящей к отталкива-

нию электронов от ароматического кольца. Следовательно, ΔE (зазор HOMO-LUMO) соединений уменьшается в ряду $C_{14}H_{10} > C_{14}H_9F > C_{14}H_9Cl > C_{14}H_9Br$, что указывает на рост поляризуемости с увеличением размера атомов галогена [30–32].

Потенциал ионизации (I) и сродство к электрону (A) антрацена и его галогенпроизводных увеличиваются в зависимости от размера атома галогена от 5.4899 эВ и 1.9114 эВ для антрацена до 5.6988 эВ и 2.1504 эВ для $C_{14}H_9Br$ соответственно. Это связано с более низкими энергиями HOMO и LUMO, которые влияют на легкость удаления и присоединения электронов [33]. Химическая жесткость (η) и мягкость (S) антрацена и его галогенпроизводных обратно пропорциональны размеру атома галогена [34]. Значения η уменьшаются с 1.7892 эВ для антрацена до 1.7742 эВ для $C_{14}H_9Br$ из-за меньшего зазора HOMO-LUMO и более высокой поляризуемости. Значения S увеличиваются с 0.5589 эВ⁻¹ для антрацена до 0.5636 эВ⁻¹ для $C_{14}H_9Br$ из-за меньшего зазора HOMO-LUMO и более высокой реакционной способности. Электрофильность (ω) и нуклеофильность (Nu) антрацена и его производных изменяются в зависимости от легирования галогеном. Значения ω демонстрируют тенденцию к возрастанию от 3.8269 эВ для антра-

цена до 4.3407 эВ для $C_{14}H_9Br$ из-за повышенной электрофильной природы галогенов. Значения N_i соответственно демонстрируют нисходящую тенденцию [35, 36]. Различные галогенные заместители (F, Cl, Br) приводят к изменению электронных свойств соединений, воздействуя на такие параметры, как π -дативное (back-donation) электронное взаимодействие ΔE и долю переносимых электронов $\Delta N(Fe)$. Конкретные эффекты зависят от природы атома галогена и электронных взаимодействий внутри его молекулярной структуры.

3.2. Оптическая спектроскопия

Расчет энергии молекул проводился с использованием программного пакета Gaussian. Оптимизация структуры молекул осуществлялась с помощью базового набора 6-311G(d,p). Для анализа электронных переходов и спектров поглощения применялся метод функционала плотности и приближение Хартри–Фока (ХФ) [37–39]. На рис. 3 показано изменение коэффициента поглощения в зависимости от длины волны падающего света. При этом более высокие коэффициенты соответствуют большему поглощению света.

Антрацен характеризуется рядом сопряженных двойных связей, которые придают ему определенные свойства, в частности, способность поглощать ультрафиолетовый свет [40–42].

Легирование антрацена первыми тремя галогенами увеличивает электронную плотность молекулярных орбиталей HOMO и LUMO. В результате уменьшается энергетическая щель между орбиталями HOMO и LUMO и меняются оптические свойства молекулы антрацена. Следовательно, электроны орбитали HOMO легированных молекул осуществляют переход между HOMO и LUMO при более низкой частоте и большей длине волны [43]. Данное явление увеличивает вероятность поглощения видимого света легированными молекулами (рис. 3). В результате легированный антрацен демонстрирует более выраженную окрашенность по сравнению с нелегированными молекулами (т. е. $\lambda = 382.8, 384.3, 387$ и 430.2 нм $C_{14}H_{10}, C_{14}H_9F, C_{14}H_9Cl$ и $C_{14}H_9Br$ соответственно).

3.3. Инфракрасная (ИК) спектроскопия

Расчет энергий молекул проводился с использованием программного пакета Gaussian. Оптимизированные структуры молекул были полу-

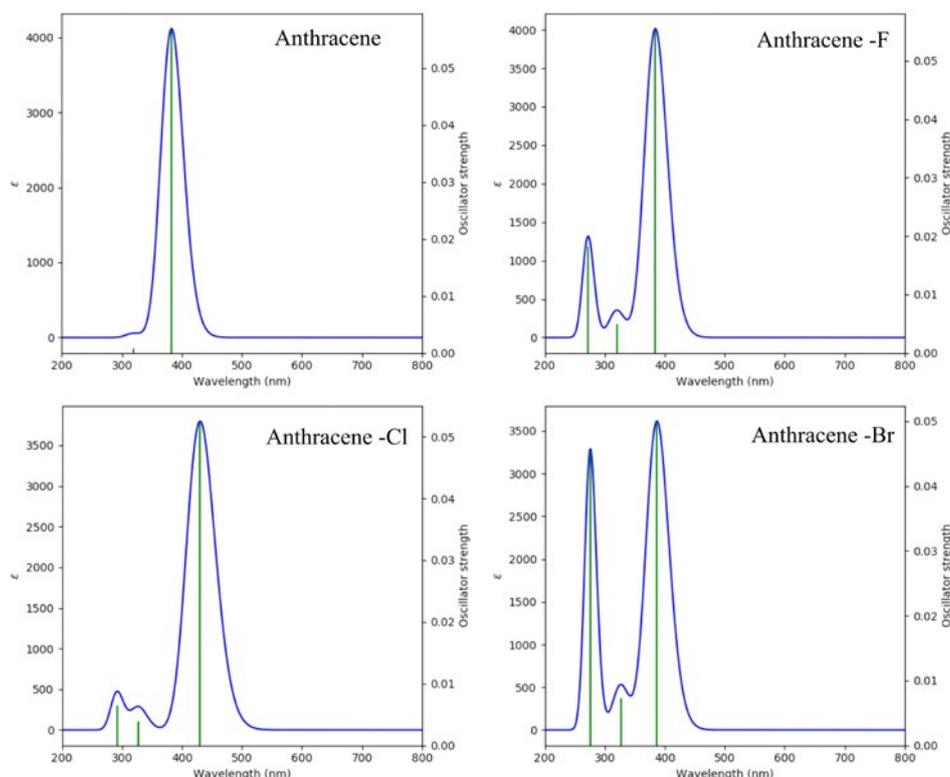


Рис. 3. Спектры поглощения излучения в видимом диапазоне для антрацена и его галогенсодержащих производных

ченны с помощью базисного набора 6-311G(d,p) [40, 44].

Идентификация сопряженных колец в структуре антрацена проводилась на основе характерных валентных колебаний связи С–Н. Примечательно, что для ПАУ валентные колебания С–Н обычно наблюдаются в области 3100 см^{-1} [45–49]. В данном исследовании дается теоретическая оценка колебательных мод для связи С–Н в диапазоне $3154\text{--}3188\text{ см}^{-1}$ (рис. 4).

Исследование влияния легирования галогенами на инфракрасные (ИК) спектры антрацена выявило ряд модификаций. Первоначально введение атомов галогенов вызывает сдвиги в положениях пиков поглощения, что указывает на изменение характера молекулярных колебаний и прочности связей (например, С=СН в не легированном антраcene при $3154\text{--}3188\text{ см}^{-1}$ смещается к $3295\text{--}3321\text{ см}^{-1}$ в антраcene, легированном фтором). Более того, появляются новые полосы поглощения, указывающие на образование новых колебательных мод и функциональных групп. Исследование также показало изменение интенсивности и ширины зоны для отдельных пиков поглощения, что указывает на

изменение степени гибкости и жесткости молекул. Примечательно, что присутствие атомов галогена приводит к появлению отчетливых пиков ИК-поглощения, связанных с самими галогенными группами. В совокупности результаты анализа позволяют составить представление об изменениях, вызванных галогенированием, и демонстрируют, как эти изменения влияют на ИК-спектры молекул антрацена.

3.4. Ядерный магнитный резонанс (ЯМР)

На рис. 5 показаны теоретически рассчитанные структуры Н-ЯМР и С-ЯМР как для чистого антрацена, так и для его производных, легированных первыми тремя элементами галогенной группы. Расчеты спектров ЯМР выполнены с использованием программного пакета Gaussian 09. Диапазон экранирования чистого антрацена составляет от -50 до 100 м.д. [24]. Примечательно, что введение фтора вызывает сдвиг м.д. в диапазоне от -100 до 300 м.д. Подобные изменения в миллионных долях наблюдались также при использовании хлора и варьировались в пределах от -200 до 700 м.д. С введением брома сдвиг м.д. усилился и составил от -500 до 2000 м.д. Эта

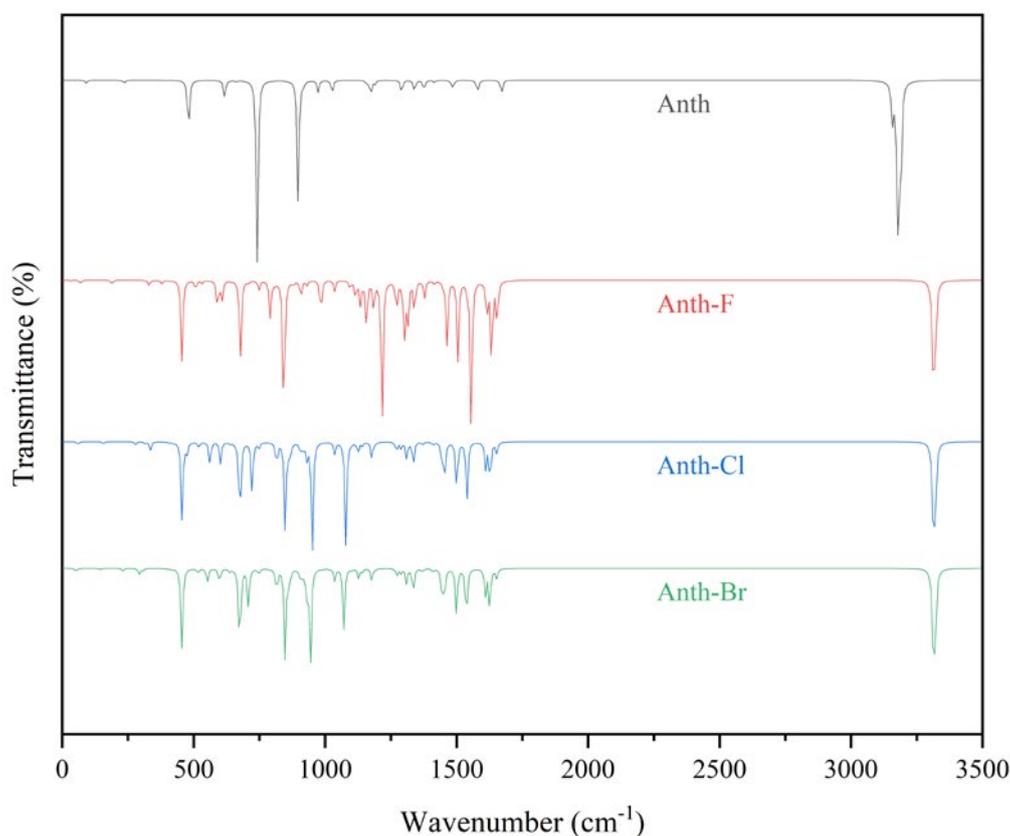


Рис. 4. ИК-спектр антрацена и его производных, галогенированных F, Cl, и Br

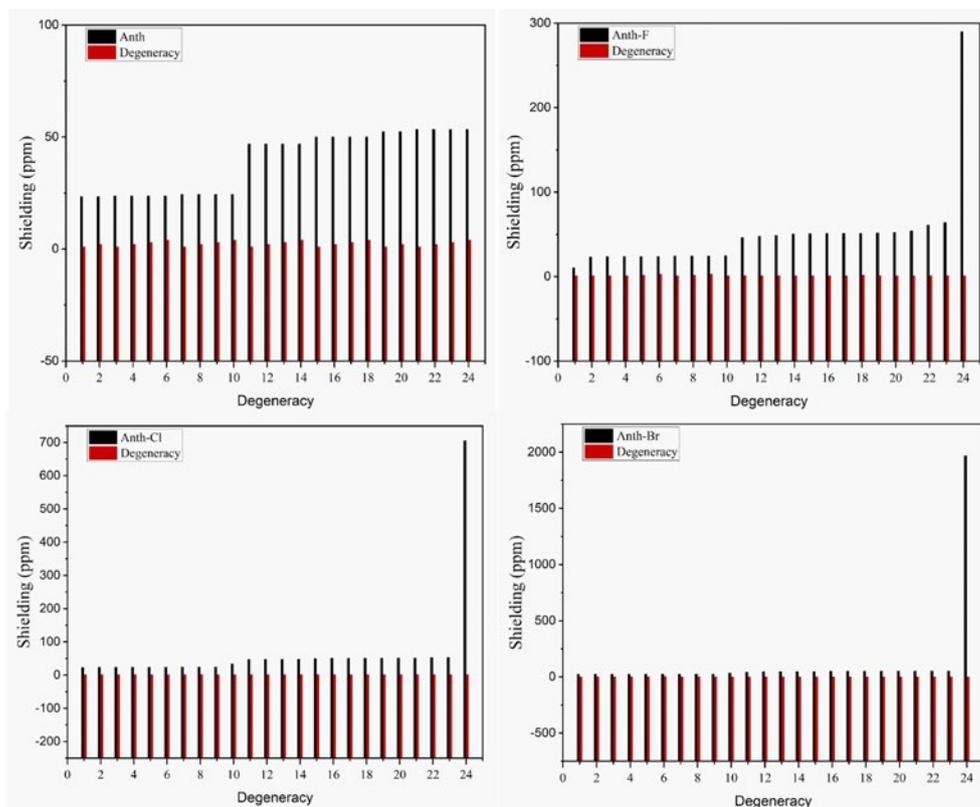


Рис. 5. ЯМР антрацена и его галогенсодержащих производных

тенденция указывает на расширение диапазона экранирования, соответствующее росту электроотрицательности галогенов. На рис. 5 показаны исходные пики ЯМР нелегированного антрацена с большим количеством углеродных резонансов в сильном поле и меньшим количеством резонансов в слабом поле. Введение фтора привело к заметному изменению ориентации молекул. Отчетливый средний пик фтора возникает при 290.128 м.д., в то время как химическое окружение атомов углерода и водорода претерпело изменения из-за индукционного эффекта и под влиянием соседних элементов структуры. Аналогичная картина наблюдалась при использовании хлора и брома, для которых пики наблюдались при 704.749 и 1968.174 м.д. соответственно. Данные результаты подчеркивает линейную зависимость между пиками ЯМР, генерируемыми соединениями семейства галогенов в антраcene, и их электроотрицательностью.

3.5. Карта потенциальной энергии и распределение заряда

Карта потенциальной энергии и распределение заряда существенно влияют на ориентацию молекул, а также их оптические и электрические свойства [50–52]. На рис. 6 представлены

карты потенциальной энергии антрацена и его галогенсодержащих производных. Данные трёхмерные карты демонстрируют, как меняется распределение зарядов внутри молекулы. Области с высокой и низкой плотностью заряда обозначены на картах разными цветами. Распределение заряда рассчитывается как суммарный заряд каждого атома или группы атомов в молекуле. Стрелками на рис. 6 обозначены направление векторов и величина дипольных моментов каждой молекулы. Дипольный момент — это векторная величина, которая характеризует полярность молекулы или расстояние между положительными и отрицательными зарядами в молекуле. Более высокий дипольный момент свидетельствует о большей полярности молекулы.

Для антрацена характерно симметричное распределение заряда и отсутствие суммарного дипольного момента, как показано на рис. 6 и в табл. 1. Т. е. молекула антрацена представляет собой неполярную молекулу без суммарного заряда. Однако при легировании антрацена галогенами, такими как фтор, хлор или бром, распределение заряда и полярность резко изменяются. Галогены более электроотрицательны, чем углерод и водород [53], и, следовательно, они притягивают к себе больше электронов. В результа-

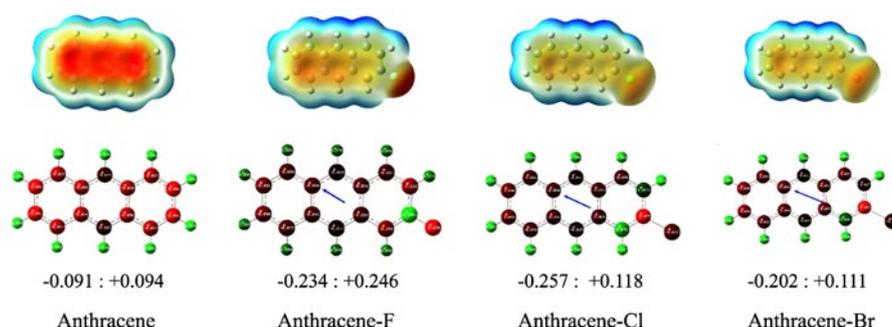


Рис. 6. Карта распределения электростатического потенциала и распределение заряда антрацена и его структур, легированных галогенами

Таблица 1. Значения квантово-химических параметров исследуемых соединений

Квантово-химические параметры	C ₁₄ H ₁₀	C ₁₄ H ₉ F	C ₁₄ H ₉ Cl	C ₁₄ H ₉ Br
Полная энергия (эВ)	-14684.7709	-17385.8899	-27191,7283	-84714.4531
E _{НОМО} (эВ)	-5.4899	-5.6231	-5.7072	-5.6988
E _{ЛУМО} (эВ)	-1.9114	-2.0515	-2.1511	-2.1504
ΔE (эВ)	3.5785	3.5716	3.5561	3.5484
Потенциал ионизации, I (эВ)	5.4899	5.6231	5.7072	5.6988
Сродство к электрону, A (эВ)	1.9114	2.0515	2.1511	2.1504
Химическая жёсткость, η (эВ)	1.7892	1.7858	1.7780	1.7742
Химическая мягкость, S (эВ ⁻¹)	0.5589	0.5600	0.5624	0.5636
Электроотрицательность, χ (эВ)	3.7006	3.8373	3.9292	3.9246
Химический потенциал, μ (эВ)	-3.7006	-3.8373	-3.9292	-3.9246
Электрофильность, ω (эВ)	3.8269	4.1228	4.3414	4.3407
Нуклеофильность, Nu (эВ ⁻¹)	0.2613	0.2426	0.2303	0.2304
π-дативное (back-donation) электронное взаимодействие, ΔE	-0.4473	-0.4464	-0.4445	-0.4436
Доля перенесенных электронов, ΔN	2.9517	2.8239	2.7300	2.7282
Дипольный момент (формула Дебая), μD	0.0000	1.7247	2.3449	2.2182

те происходит смещение электронной плотности от углеродных колец к атому галогена, что в свою очередь приводит к асимметричному распределению заряда и образованию суммарного дипольного момента в молекуле. В табл. 1 показано, что наибольший дипольный момент характерен для антрацена, легированного хлором (2.3449), за ним следуют антрацен, легированный бромом (2.2182), и антрацен, легированный фтором (1.7247). Это означает, что молекулы антрацена, легированного хлором, наиболее полярны и обладают большей реакционной способностью по сравнению с остальными образцами на рис. 6.

3.6. Приведенный градиент плотности и нековалентные взаимодействия

Использование приведенного градиента плотности (reduced density gradient, RDG) и мето-

да идентификации нековалентных взаимодействий (noncovalent interactions, NCI) произвело революцию в исследовании слабых межмолекулярных взаимодействий. Приведенный градиент плотности является надежным инструментом, позволяющим установить наличие или отсутствие нековалентных взаимодействий. RDG — это безразмерный параметр, который объединяет плотность и ее производную. Для создания диаграмм рассеяния RDG в уравнении (1) использовалась программа Multiwfn. Изоповерхности были получены в программе VMD:

$$RDG(r) = \frac{1|\nabla\rho(r)|}{2(3\pi r^2)^{\frac{1}{3}}\rho^{\frac{4}{3}}(r)} \quad (1)$$

При анализе NCI устанавливалось пороговое значение изоповерхности 0.5 ат. ед. в пре-

делах диапазона изоповерхности RDG от -0.035 до 0.02 ат. ед., как показано на рис. 7. Дальнейший анализ основывался на результатах графической репрезентации, где функция $\rho(r)$ соответствует знаку λ_2 , что позволяет уточнить характер молекулярных взаимодействий. Полярность $(\lambda_2)\rho$ позволяет сделать следующее предположение: отрицательное значение указывает на взаимное притяжение, а положительное значение свидетельствует об отталкивающих, несвязанных взаимодействиях. Диаграммы рассеяния, представленные на рис. 7, отражают сложность данных взаимодействий. Путем расслоения пиков на основе знака $(\lambda_2)\rho$ получаем отдельные

зоны с цветовой кодировкой: красный для сильного отталкивания, зеленый для слабого притяжения (Ван-дер-Ваальсовы взаимодействия) и синий для сильных межмолекулярных взаимодействий, в частности для прочных водородных связей. Полученные результаты подчеркивают ключевую роль методологий RDG и NCI в расшифровке сложной динамики межмолекулярных взаимодействий [54–58].

Для образцов, содержащих фтор, концентрация точек на графике была выше, чем для других соединений. Это указывает на то, что слабые водородные связи и Ван-дер-Ваальсовы взаимодействия внутри фторсодержащих соедине-

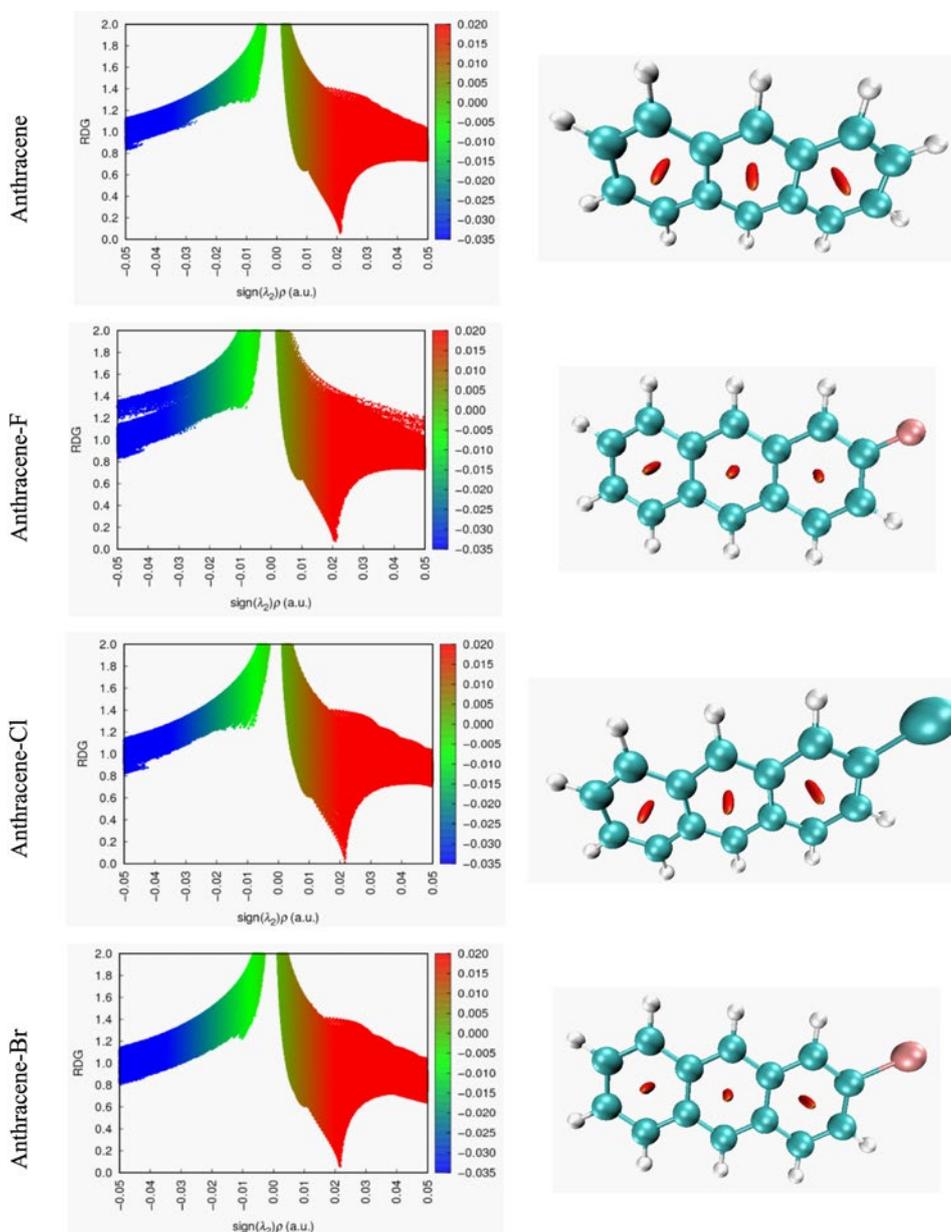


Рис. 7. Анализ RDG исследуемых соединений – слабые и сильные взаимодействия

ний более устойчивы. Это также подтверждается красными областями на рис. 7, которые локализованы внутри ароматических колец и соответствуют сильным отталкивающим взаимодействиям. Кроме того, на рис. 7 появляется зеленая изоповерхность, связанная с соединением антрацена и также указывающая на наличие Ван-дер-Ваальсовых взаимодействий. Расположение данной изоповерхности подтверждает наличие этих взаимодействий. Вместе с тем это свидетельствует о слабой водородной связи и дополнительных водородных контактах (Н–Н).

Оценка потенциала соединения в качестве лекарственного средства предполагает определенную последовательность действий и часто включает в себя расчет значений свойств исследуемых структур с использованием программного обеспечения Molinspiration с целью установления соответствия «правилу пяти» Липинского. Данное правило получило широкое распространение и предполагает, что эффективные лекарственные средства должны соответствовать следующим критериям: менее пяти доноров водородных связей; менее десяти акцепторов водородных связей; молярная рефракция от 40 до 160; площадь полярной поверхности молекулы менее 140 Å²; молекулярная масса менее 500; и менее десяти вращающихся связей [59, 60].

В табл. 2 показано, как изменяются молекулярные свойства антрацена и его галогенпроизводных в зависимости от типа присоединенного галогена. Молекулярная масса антрацена увеличивается с увеличением размера и полярности галогена, что делает его менее летучим и плотным. При добавлении фтора появляется один дополнительный акцептор водородных связей, что усиливает водородные связи и растворимость антрацена. Площадь полярной поверхности молекулы антрацена и его производных остается нулевой, что указывает на низ-

кую полярность и высокую проницаемость. Эти свойства определяют химическое и биологическое поведение данных молекул.

3.7. *Натуральный анализ заселенностей (NBO)*

Используя метод B3LYP/6–31G(d, p), мы провели детальное исследование конфигурации NBO рассматриваемого соединения. Основное внимание уделялось выяснению взаимодействия между орбиталями льюисовского и нельюисовского типа, внутримолекулярным и межмолекулярным водородным связям, а также дисперсии π-электронов. Энергия стабилизации (мера делокализации связей) оценивалась с использованием энергии второго порядка для отдельных донорных NBO (*i*) и акцепторных NBO (*j*) в уравнении (2), в результате чего получали значения $E(2)$, отражающие делокализацию электронов. Математически это выражается уравнением [61–65]:

$$E^{(2)}q = \Delta E_{ij} = q_i \frac{F(i, j)^2}{\epsilon_j - \epsilon_i} \quad (2)$$

Здесь q_i обозначает заселенность орбитали донора, ϵ_j и ϵ_i представляют собой диагональные элементы, а $F(i, j)$ означает элементы матрицы Фока, характеризующей взаимодействие орбиталей. В табл. 3 представлены результаты детального анализа матрицы Фока, проведенного на основе теории возмущений второго порядка для ряда соединений, в частности антрацена и его производных: антрацен (нейтральный), антрацен (+Cl), антрацен (+Br) и антрацен (+F). Таблица демонстрирует характер взаимодействий между донорными и акцепторными NBO и отражает значения $E(2)$, которые соответствуют значительным энергиям стабилизации. Более того, она демонстрирует различия в энергии ($E(j) - E(i)$) в атомных единицах и связанных с ними значениях $F(i, j)$ в

Таблица 2. Оценка параметров изученных соединений, рассчитанная в программе Molinspiration

Дескрипторы	Антрацен				Ожидаемый диапазон
	Нейтральный	+Cl	+Br	+F	
Донор водородной связи (HBD)	0	0	0	0	5
Акцепторы водородной связи (HBA)	0	0	0	1	10
Молярная рефракция	61.45	66.46	69.15	61.41	40–160
Площадь полярной поверхности (PSA), Å ²	0.00	0.00	0	0	140
Молекулярная масса	178.23	212.67	257.13	196.22	500
Количество вращающихся связей	0	0	0	0	10

Таблица 3. Анализ матрицы Фока на основе теории возмущений второго порядка

Антрацен (нейтральный)				
Донорская NBO (<i>i</i>)	Акцепторная NBO (<i>j</i>)	<i>E</i> (2) ккал/моль	<i>E</i> (<i>j</i>)– <i>E</i> (<i>i</i>) ат. ед.	<i>F</i> (<i>i,j</i>) ат. ед.
π C 1 – C 2	π^* C 3 – C 4	17.63	0.28	0.063
π C 1 – C 2	π^* C 9 – C 10	18.4	0.29	0.068
σ C 1 – H 7	σ^* C 5 – C 6	4.96	1.04	0.064
π C 9 – C 10	π^* C 1 – C 2	17.17	0.3	0.066
π C 9 – C 10	π^* C 11 – C 12	16.43	0.3	0.063
σ C 9 – H 13	σ C 2 – C 3	4.59	1.04	0.062
π C 18 – C 19	LP (1) C 5	35.32	0.16	0.085
LP (1) C 5	π^* C 3 – C 4	69.28	0.14	0.106
LP (1) C 5	π^* C 18 – C 19	52.46	0.14	0.099
LP*(1) C 6	π^* C 1 – C 2	69.27	0.14	0.106
Антрацен (+Cl)				
π C 1 – C 2	π^* C 9 – C 10	21.32	0.28	0.071
σ C 1 – H 7	σ^* C 5 – C 6	4.65	1.1	0.064
σ C 2 – C 9	σ^* C 2 – C 3	4.76	1.26	0.069
σ C 6 – C 17	σ^* C 20 – Cl 24	5.09	0.83	0.058
π C 11 – C 12	π^* C 9 – C 10	19.14	0.28	0.066
π C 18 – C 19	π^* C 4 – C 5	18.92	0.29	0.069
LP*(1) C 3	π^* C 1 – C 2	72.87	0.14	0.107
LP (1) C 6	π^* C 1 – C 2	67.29	0.14	0.104
LP (1) C 6	π^* C 17 – C 20	78.61	0.12	0.106
π^* C 17 – C 20	π^* C 18 – C 19	191.31	0.01	0.077
Антрацен (+Br)				
σ C 1 – C 6	σ^* C 5 – C 6	4.85	1.26	0.07
σ C 6 – C 17	σ^* C 20 – Br 24	5.23	0.78	0.057
π C 9 – C 10	π^* C 1 – C 2	19.86	0.29	0.07
π C 11 – C 12	π^* C 9 – C 10	19.13	0.28	0.066
σ C 12 – H 16	σ^* C 2 – C 3	4.85	1.1	0.066
σ C 18 – C 19	σ^* C 20 – Br 24	5.32	0.79	0.058
LP*(1) C 3	π^* C 1 – C 2	72.77	0.14	0.107
LP (1) C 6	π^* C 17 – C 20	78.4	0.12	0.106
LP (3) Br 24	π^* C 17 – C 20	10.54	0.31	0.054
π^* C 17 – C 20	π^* C 18 – C 19	196.36	0.01	0.077
Антрацен (+F)				
π C 1 – C 6	π^* C 4 – C 5	17.39	0.28	0.063
π C 1 – C 6	π^* C 17 – C 20	18.45	0.28	0.066
σ C 1 – H 7	σ^* C 2 – C 3	4.97	1.04	0.064
σ C 4 – H 8	σ^* C 5 – C 6	5.01	1.04	0.065
π C 17 – C 20	π^* C 18 – C 19	15.31	0.31	0.062
π C 18 – C 19	π^* C 4 – C 5	15.86	0.3	0.065
LP*(1) C 2	π^* C 1 – C 6	69.7	0.14	0.105
LP*(1) C 2	π^* C 9 – C 10	51.66	0.14	0.098
LP (1) C 3	π^* C 11 – C 12	52.31	0.14	0.099
LP (3) F 24	π^* C 17 – C 20	19.73	0.44	0.087

атомных единицах, что также указывает на сложный характер взаимодействий внутри этих молекул. Так, для варианта антрацен (+Br) характерен существенный переход, поскольку орбиталь LP (3) Br 24 отдает электроны акцептору π^* C 17 – C 20, что приводит к формированию значительной энергии стабилизации – 78.61 ккал/моль. Этот переход подчеркивает силу межмолекулярных взаимодействий, что указывает на сильное сродство связывания между атомом Br и фенильным кольцом. По сравнению с остальными производными антрацен (+F) также демонстрирует особый характер взаимодействий. Здесь π C 1 – C 6 взаимодействует с π^* C 4 – C 5, что приводит к энергии стабилизации 17.39 ккал/моль. Это взаимодействие, хотя и энергетически выгодно, подчеркивает относительно более слабое влияние фтора по сравнению с другими заместителями, такими как хлор и бром.

3.8. Нелинейные оптические свойства

Нелинейные оптические материалы имеют первостепенное значение в сфере нелинейной оптики, а также в других промышленных приложениях, играя ключевую роль, в частности, в области информационных технологий. Оптимизация геометрии проводилась с помощью метода V3LYP/6-31G+(d,p) с последующим первоначальным статическим анализом. Вычисление трехмерного тензора, обозначаемого как (β_0) и представляющего начальную статическую гиперполяризуемость, проводилось на основе уравнений для его компонентов x, y и z (уравнение (3)). Эти компоненты позволяют определить общий статический дипольный момент (μ_t), среднюю поляризуемость (α_0) и начальную статическую гиперполяризуемость (β_0) [61, 66]:

$$\mu_t = \left[\mu_x^2 + \mu_y^2 + \mu_z^2 \right]^{1/2},$$

$$\alpha_t = \frac{(\alpha_{xx} + \alpha_{yy} + \alpha_{zz})}{3}, \tag{3}$$

$$\beta_t = (\beta_x^2 + \beta_y^2 + \beta_z^2)^{1/2} \beta_x = \beta_{xxx} + \beta_{xyz} + \beta_{xzz} \beta_y = \beta_{yy} + \beta_{xy} + \beta_{yzz} \beta_z = \beta_{zzz} + \beta_{xxz} + \beta_{yzz}.$$

Примечательно, что значительные величины составляющих удельной поляризуемости и гиперполяризуемости указывают на выраженную дисперсию заряда в отдельных ориентациях [67, 68]. В табл. 4 представлены расчетные значения для соединений с различными заместителями (+Cl, +Br, +F), характеризующие их молекулярные дипольные моменты (μ), среднюю поляри-

Таблица 4. Нелинейные оптические свойства исследуемых соединений

Параметры	Антрацен			
	Нейтральный	+Cl	+Br	+F
μ_x	0.00	1.00	-0.91	0.16
μ_y	0.00	2.11	1.96	1.72
μ_z	0.00	0.00	0.00	0.00
μ_t	0.00	2.33	2.16	1.73
α_{xx}	-88.00	-82.73	-87.81	-73.86
α_{yy}	-70.76	-92.01	-93.64	-85.13
α_{zz}	-71.35	-99.63	-105.33	-91.38
α_0	-76.70	-91.46	-95.59	-83.46
$\alpha(esu) * 10^{-24}$	-11.37	-13.55	-14.17	-12.37
β_{xxx}	0.00	3.00	26.22	-13.72
β_{xyy}	0.00	16.86	3.93	17.15
β_{xzz}	0.00	-3.38	16.47	-6.69
β_x	0.00	16.48	46.62	-3.26
β_{yyy}	0.00	53.18	-64.00	-34.45
β_{xyx}	0.00	3.46	-30.20	4.96
β_{yzz}	0.00	-11.73	-53.29	16.86
β_y	0.00	44.91	-147.50	-12.63
β_{zzz}	0.00	0.00	0.00	0.00
β_{xxz}	0.00	0.00	0.00	0.00
β_{yyz}	0.00	0.00	0.00	0.00
β_z	0.00	0.00	0.00	0.00
$\beta_0(esu) * 10^{-33}$	0.00	47.84	154.69	13.4

зуемость (α_0) и начальную гиперполяризуемость (β_0). Эти значения, первоначально представленные в атомных единицах (ат. ед.), были для удобства сопоставительного анализа преобразованы в электростатические единицы. Примечательно, что дипольные моменты соединений (+Cl, +Br, +F) превосходят дипольные моменты молекулы мочевины ($\mu = 1.3732$ Д), часто используемой в качестве эталона в исследованиях нелинейных оптических материалов.

Что касается поляризуемости, результаты показывают, что антрацен проявляет более высо-

кую поляризуемость при воздействии положительного индукционного эффекта фтора, тогда как при положительном индукционном эффекте брома степень поляризуемости антрацена уменьшается. Для нелинейных оптических материалов величина (β_0) имеет существенное значение. Примечательно, что рассчитанные значения β_0 для исследованных соединений сравнительно ниже, чем эталонное значение мочевины ($343.272 \cdot 10^{-33}$ эл.-ст. ед.), что позволяет предположить, что эти соединения могут иметь ограниченный потенциал для практического применения в качестве нелинейных оптических материалов.

4. Выводы

В статье представлены результаты всестороннего исследования влияния галогенирования на антрацен. С использованием метода DFT были установлены особенности электронной структуры, реакционной способности и оптического поведения, поскольку данные параметры изменяются в присутствии атомов галогенов. Полученные результаты подчеркивают тонкую природу воздействия галогенов, таких как фтор, хлор и бром, на свойства и потенциал антрацена. Различные методы анализа, включающие метод молекулярных орбиталей, оптическую спектроскопию, анализ колебательных частот, анализ смещений в спектрах ЯМР, а также натуральный анализ заселенностей, в совокупности иллюстрируют сложный характер воздействия галогенирования. Представленное исследование выходит за рамки теоретических границ и охватывает практические сферы, предлагая взглянуть на достижения в медицине, экологии и органической электронике. Галогенирование с его преобразующими эффектами может быть использовано для улучшения свойств антрацена в целом ряде научных областей.

Заявленный вклад авторов

Все авторы сделали эквивалентный вклад в подготовку публикации.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет известных финансовых конфликтов интересов или личных отношений, которые могли бы повлиять на работу, представленную в этой статье.

Список литературы

1. Rebaz O. Rashid R., Othman K. Exploring The Synthesis of 1,2,4-Triazole Derivatives: A

Comprehensive Review. *Journal of Physical Chemistry and Functional Materials*. 2023;6(1): 43–56, <https://doi.org/10.54565/jphcfum.1263834>

2. Omar R. Koparir P., Koparir M. Synthesis of 1,3-thiazole derivatives. *Indian Drugs*. 2021;58(1): 7–19. <https://doi.org/10.53879/id.58.01.12427>

3. Tang M., Yu Q., Wang Z.,... Zhang F. L. Synthesis of polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) via a transient directing group. *Organic Letters*. 2018;20(23): 7620–7623. <https://doi.org/10.1021/acs.orglett.8b03359>

4. Lawal A. T. and Fantke P. Polycyclic aromatic hydrocarbons. A review. *Cogent Environmental Science*. 2017;3(1): 1339841. <https://doi.org/10.1080/23311843.2017.1339841>

5. Ding Z. B. Tommasini M., Maestri M. A topological model for predicting adsorption energies of polycyclic aromatic hydrocarbons on late-transition metal surfaces. *Reaction Chemistry & Engineering*. 2019;4(2): 410–417. <https://doi.org/10.1039/c8re00229k>

6. Rebaz O. Ahmed L. Koparir P., Jwameer H. Impact of solvent polarity on the molecular properties of dimetridazole. *El-Cezeri Fen ve Mühendislik Dergisi*. 2022;9(2): 740–747. <https://doi.org/10.31202/ecjse.1000757>

7. Mccoull K. D. Rindgen D. Blair I. A. and Penning T. M. Synthesis and characterization of polycyclic aromatic hydrocarbon o-quinone depurinizing N7-guanine adducts. *Chemical Research in Toxicology*. 1999;12(3): 237–246, <https://doi.org/10.1021/tx980182z>

8. Sahoo B. M. Ravi Kumar B. V. V., Banik B. K., Borah P. Polyaromatic hydrocarbons (PAHs): structures, synthesis and their biological profile. *Current Organic Synthesis*. 2020;17(8): 625–640. <https://doi.org/10.2174/1570179417666200713182441>

9. Barbosa F., Jr. Rocha B. A., Souza M. C. O., ... Campiglia A. D. Polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs): Updated aspects of their determination, kinetics in the human body, and toxicity. *Journal of Toxicology and Environmental Health, Part B*. 2023;26(1): 28–65. <https://doi.org/10.1080/10937404.2022.2164390>

10. Palmer A. J. Ghani R. A. Kaur N. Phanstiel O., Wallace H. M. A putrescine–anthracene conjugate: a paradigm for selective drug delivery. *Biochemical Journal*. 2009;424(3): 431–438. <https://doi.org/10.1042/BJ20090815>

11. Koparir P., Parlak A. E., Karatepe A., Omar R. A. Elucidation of potential anticancer, antioxidant and antimicrobial properties of some new triazole compounds bearing pyridine-4-yl moiety and cyclobutane ring. *Arabian Journal of Chemistry*. 2022;15(7): 103957. <https://doi.org/10.1016/j.arabjc.2022.103957>

12. Haritash A. K., Kaushik C. P. Biodegradation aspects of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons (PAHs): A review. *Journal of Hazardous Materials*. 2009;169(1-3): 1–15. <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2009.03.137>
13. Abdel-Shafy H. I., Mansour M. S. M. A review on polycyclic aromatic hydrocarbons: Source, environmental impact, effect on human health and remediation. *Egyptian Journal of Petroleum*. 2016;25(1): 107–123. <https://doi.org/10.1016/j.ejpe.2015.03.011>
14. Li W., Wu S. Challenges of halogenated polycyclic aromatic hydrocarbons in foods: Occurrence, risk, and formation. *Trends in Food Science & Technology*. 2023;131: 1–13. <https://doi.org/10.1016/j.tifs.2022.11.015>
15. Montgomery Jr. J. A., Frisch M. J., Ochterski J. W., Petersson G. A. A complete basis set model chemistry. VI. Use of density functional geometries and frequencies. *The Journal of Chemical Physics*. 1999;110(6): 2822–2827. <https://doi.org/10.1063/1.477924>
16. Rasul H. H., Mamad D. M., Azeez Y. H., Omer R. A., Omer K. A. Theoretical investigation on corrosion inhibition efficiency of some amino acid compounds. *Computational and Theoretical Chemistry*. 2023;1225: 114177. <https://doi.org/10.1016/j.comptc.2023.114177>
17. Omer R. A. Koparir P., Ahmed L. Theoretical determination of corrosion inhibitor activities of 4-allyl-5-(pyridin-4-yl)-4H-1,2,4-triazole-3-thiol-thione tautomerism. *Indian Journal of Chemical Technology*. 2022;29(1): 75–81. <https://doi.org/10.56042/ijct.v29i1.51231>
18. Omer R., Koparir P., Koparir M., Rashid R., Ahmed L., Hama J. Synthesis, Characterization and DFT Study of 1-(3-Mesityl-3-methylcyclobutyl)-2-((4-phenyl-5-(thiophen-2-yl)-4H-1,2,4-triazol-3-yl)thio)ethan-1-one. *Protection of Metals and Physical Chemistry of Surfaces*. 2022;58(5): 1077–1089. <https://doi.org/10.1134/S2070205122050185>
19. Costa A. C., Jr. Ondar G. F., Versiane O., ... Tellez Soto C. A. DFT: B3LYP/6-311G (d, p) vibrational analysis of bis-(diethyldithiocarbamate)zinc (II) and natural bond orbitals. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*. 2013;105: 251–258. <https://doi.org/10.1016/j.saa.2012.11.097>
20. Tirado-Rives J., Jorgensen W. L. Performance of B3LYP density functional methods for a large set of organic molecules. *Journal of Chemical Theory and Computation*. 2008;4(2): 297–306. <https://doi.org/10.1021/ct700248k>
21. Nasidi I. I., Kaygili O., Majid A., Bulut N., Alkhedher M., ElDin S. M. Halogen doping to control the band gap of ascorbic acid: A theoretical study. *ACS Omega*. 2022; 7(48): 44390–44397. <https://doi.org/10.1021/acsomega.2c06075>
22. Dittmer D. C., Chang P. L., Davis F. A., Iwanami M., Stamos I. Takahashi K. Derivatives of thiacyclobutene (thiete). VI. Synthesis and properties of some thietes. *The Journal of Organic Chemistry*. 1972;37(8): 1111–1115. <https://doi.org/10.1021/jo00973a008>
23. Becke A. D. Density-functional thermochemistry. III. The role of exact exchange. *The Journal of Chemical Physics*. 1993;98(7): 5648–5652. <https://doi.org/10.1063/1.464913>
24. Wilbur D., Manning W. B., Hilton B. D., Muschik G. M. Carbon-13 NMR of polycyclic aromatic compounds. 1-Methoxybenz[a]anthracene-7, 12-diones. *Organic Magnetic Resonance*. 1982;18(2): 63–67. <https://doi.org/10.1002/mrc.1270180202>
25. Aihara J. Reduced HOMO–LUMO gap as an index of kinetic stability for polycyclic aromatic hydrocarbons. *The Journal of Physical Chemistry A*. 1999;103(37): 7487–7495. <https://doi.org/doi.org/10.1021/jp990092i>
26. Sun Z., Wu J. Open-shell polycyclic aromatic hydrocarbons. *Journal of Materials Chemistry*. 2012;22(10): 4151–4160. <https://doi.org/10.1039/C1JM14786B>
27. Aziz S. B., Abdullah O. G., Hussein A. M., ... Mohammed A. R. Optical properties of pure and doped PVA:PEO based solid polymer blend electrolytes: two methods for band gap study. *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*. 2017;28: 7473–7479. <https://doi.org/10.1007/s10854-017-6437-1>
28. Sarmah A., Hobza P. Directly linked metalloporphyrins: a quest for bio-inspired materials. *Materials Advances*. 2020;1(6): 1895–1908. <https://doi.org/10.1039/d0ma00461h>
29. Lazarou Y. G., Prosmittis A. V., Papadimitriou V. C., Papagiannakopoulos P. Theoretical calculation of bond dissociation energies and enthalpies of formation for halogenated molecules. *The Journal of Physical Chemistry A*. 2001;105(27): 6729–6742. <https://doi.org/10.1021/jp010309k>
30. Tang M. L., Bao Z. Halogenated materials as organic semiconductors. *Chemistry of Materials*. 2011;23(3): 446–455. <https://doi.org/10.1021/cm102182x>
31. Akbas E., Othman K. A., Çelikezen F. Ç., ... Mardinoglu A. Synthesis and biological evaluation of novel benzylidene thiazolo pyrimidin-3(5H)-one derivatives. *Polycyclic Aromatic Compounds*. 2023: 1–18. <https://doi.org/10.1080/10406638.2023.2228961>
32. Wang D., Chen L., Shi C., ... Chen Y. Quantum spin Hall insulator in halogenated arsenene films with sizable energy gaps. *Scientific Reports*. 2016;6(1): 28487. <https://doi.org/10.1038/srep28487>
33. Janietz S., Bradley D., Grell M., Giebeler C., Inbasekaran M., Woo E. Electrochemical determination of the ionization potential and electron affinity of

- poly(9,9-dioctylfluorene). *Applied Physics Letters*. 1998;73(17): 2453–2455. <https://doi.org/10.1063/1.122479>
34. Pearson R. G. Chemical hardness and density functional theory. *Journal of Chemical Sciences*. 2005;117: 369–377. <https://doi.org/10.1007/BF02708340>
35. Chattaraj P. K., Roy D. R. Update 1 of: electrophilicity index. *Chemical Reviews*. 2007;107(9): PR46–PR74. <https://doi.org/10.1021/cr078014b>
36. Mayr H., Patz M. Scales of nucleophilicity and electrophilicity: a system for ordering polar organic and organometallic reactions. *Angewandte Chemie International Edition in English*. 1994;33(9): 938–957. <https://doi.org/10.1002/anie.199409381>
37. Ceylan Ü., Tarı G. Ö., Gökce H., Açar E. Spectroscopic (FT–IR and UV–Vis) and theoretical (HF and DFT) investigation of 2-Ethyl-N-[(5-nitrothiophene-2-yl)methylidene]aniline. *Journal of Molecular Structure*. 2016;1110: 1–10. <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2016.01.019>
38. Esme A. Experimental (FT-IR, FT-Raman, and UV-Vis) and quantum chemical calculations on monomer and dimer structures of 1-hydroxy-2-naphthoic acid using the DFT and TD-DFT methods. *Indian Journal of Pure & Applied Physics (IJPAP)*. 2019;57(11): 822–835. Режим доступа: <http://op.niscpr.res.in/index.php/IJPAP/article/view/21985>
39. Jagdale B. S., Ashok Adole V., Bhavsing Pawar T., Desale B. S. Molecular structure, frontier molecular orbitals, MESP and UV–visible spectroscopy studies of ethyl 4-(3,4-dimethoxyphenyl)-6-methyl-2-oxo-1,2,3,4-tetrahydropyrimidine-5-carboxylate: a theoretical and experimental appraisal. *Material Science Research India*. 2020;17(Special issue 1): 13–26. <https://doi.org/10.13005/msri.17.special-issue1.04>
40. Li A., Draine B. Do the infrared emission features need ultraviolet excitation? The polycyclic aromatic hydrocarbon model in UV-poor reflection nebulae. *The Astrophysical Journal*. 2002;572(1): 232–237. <https://doi.org/10.1086/340285>
41. Arfsten D. P., Schaeffer D. J., Mulveny D. C. The effects of near ultraviolet radiation on the toxic effects of polycyclic aromatic hydrocarbons in animals and plants: a review. *Ecotoxicology and Environmental Safety*. 1996;33(1): 1–24. <https://doi.org/10.1006/eesa.1996.0001>
42. Jones R. N. The ultraviolet absorption spectra of anthracene derivatives. *Chemical Reviews*. 1947;41(2): 353–371. <https://doi.org/10.1021/cr60129a013>
43. Makula P., Pacia M., Macyk W. How to correctly determine the band gap energy of modified semiconductor photocatalysts based on UV-vis spectra. *The Journal of Physical Chemistry Letters*. 2018;9(23): 6814–6817. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcllett.8b02892>
44. Wodrich M. D., Corminboeuf C., Schreiner P. R., Fokin A. A., Schleyer P. v. R. How accurate are DFT treatments of organic energies? *Organic Letters*. 2007;9(10): 1851–1854. <https://doi.org/10.1021/ol070354w>
45. Swofford R. L., Long M. E., Albrecht A. C. C–H vibrational states of benzene, naphthalene, and anthracene in the visible region by thermal lensing spectroscopy and the local mode model. *The Journal of Chemical Physics*. 1976;65(1): 179–190. <https://doi.org/10.1063/1.432815>
46. Ricks A. M., Douberly G. E., Duncan M. A. The infrared spectrum of protonated naphthalene and its relevance for the unidentified infrared bands. *The Astrophysical Journal*. 2009;702(1): 301–306. <https://doi.org/10.1088/0004-637X/702/1/301>
47. Szczepanski J., Vala M., Talbi D., Parisel O., Ellinger Y. Electronic and vibrational spectra of matrix isolated anthracene radical cations: Experimental and theoretical aspects. *The Journal of Chemical Physics*. 1993;98(6): 4494–4511. <https://doi.org/10.1063/1.465009>
48. McClellan A. L., Pimentel G. C. Vibrational assignment and thermodynamic properties of naphthalene. *The Journal of Chemical Physics*. 1955;23(2): 245–248. <https://doi.org/10.1063/1.1741948>
49. Srivastava A., Singh V. B. Theoretical and experimental studies of vibrational spectra of naphthalene and its cation. *Indian Journal of Pure & Applied Physics*. 2007;45: 714–720.
50. Haenen H. T. M. Potential probe measurement analysis and charge distribution determination. *Journal of Electrostatics*. 1977;2: 203–222. [https://doi.org/10.1016/0304-3886\(77\)90054-7](https://doi.org/10.1016/0304-3886(77)90054-7)
51. Solano E. A., Mayer P. M. A complete map of the ion chemistry of the naphthalene radical cation? DFT and RRKM modeling of a complex potential energy surface. *The Journal of Chemical Physics*. 2015;143(10). <https://doi.org/10.1063/1.4930000>
52. Pi X., Sun F., Gao J., ... Liu H. A new insight into the SO₂ adsorption behavior of oxidized carbon materials using model adsorbents and DFT calculations. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 2019;21(18): 9181–9188. <https://doi.org/10.1039/c8cp07782g>
53. Modelli A., Mussoni L., Fabbri D. Electron affinities of polycyclic aromatic hydrocarbons by means of B3LYP/6-31+G* calculations. *The Journal of Physical Chemistry A*. 2006;110(20): 6482–6486. <https://doi.org/10.1021/jp0605911>
54. Domingo L. R., Aurell M. J., Pérez P., Contreras R. Quantitative characterization of the global electrophilicity power of common diene/dienophile pairs in Diels–Alder reactions. *Tetrahedron*. 2002;58(22): 4417–4423. [https://doi.org/10.1016/s0040-4020\(02\)00410-6](https://doi.org/10.1016/s0040-4020(02)00410-6)

55. Boukabcha N., Benmohammed A., Belhachemi M. H. M., ... Djafri A. Spectral investigation, TD-DFT study, Hirshfeld surface analysis, NCI-RDG, HOMO-LUMO, chemical reactivity and NLO properties of 1-(4-fluorobenzyl)-5-bromolindolin-2,3-dione. *Journal of Molecular Structure*. 2023;1285: 135492. <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2023.135492>
56. Lu T., Chen F. Multiwfn: A multifunctional wavefunction analyzer. *Journal of Computational Chemistry*. 2012;33(5): 580–592. <https://doi.org/10.1002/jcc.22885>
57. Humphrey W., Dalke A., Schulten K. VMD: Visual molecular dynamics. *Journal of Molecular Graphics*. 1996;14(1): 33–38. [https://doi.org/10.1016/0263-7855\(96\)00018-5](https://doi.org/10.1016/0263-7855(96)00018-5)
58. Saidj M., Djafri A., Rahmani R., ... Chouaih A. Molecular structure, experimental and theoretical vibrational spectroscopy, (HOMO-LUMO, NBO) investigation, (RDG, AIM) analysis, (MEP, NLO) study and molecular docking of ethyl-2-[[4-ethyl-5-(quinolin-8-yloxymethyl)-4H-1,2,4-triazol-3-yl] sulfanyl] acetate. *Polycyclic Aromatic Compounds*. 2023;43(3): 2152–2176. <https://doi.org/10.1080/10406638.2022.2039238>
59. Walters W. P., Murcko M. A. Prediction of 'drug-likeness'. *Advanced Drug Delivery Reviews*. 2002;54(3): 255–271. [https://doi.org/10.1016/s0169-409x\(02\)00003-0](https://doi.org/10.1016/s0169-409x(02)00003-0)
60. Ursu O., Rayan A., Goldblum A., Oprea T. I. Understanding drug-likeness. *WIREs Computational Molecular Science*. 2011;1(5): 760–781. <https://doi.org/10.1002/wcms.52>
61. Ranjith P., Ignatious A., Panicker C. Y., ... Anto P. Synthesis, spectroscopic characterization, DFT, molecular docking and in vitro antibacterial potential of novel quinoline derivatives. *Journal of Molecular Structure*. 2022;1264: 133315. <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2021.131217>
62. Sumathi D., Thanikachalam V., Bharanidharan S., Saleem H., Babu N. R. Vibrational Characterization and Molecular Electronic Investigations of 2-acetyl-5-methylfuran using FT-IR, FT-Raman, UV-VIS, NMR, and DFT Methods. *Journal of Fluorescence*. 2022;32: 1005–1017. <https://doi.org/10.1007/s10895-022-02903-8>
63. Abbas T., Bendjeddou A., Villemin D. Structure, electronic properties, NBO, NLO and chemical reactivity of bis (1, 4-dithiafulvalene) derivatives: functional density theory study. *International Journal of Advanced Chemistry*. 2017;6(1): 18–25. <https://doi.org/10.14419/ijac.v6i1.8668>
64. Villemin D., Abbas T., Bendjeddou A. Molecular structure, HOMO, LUMO, MEP, natural bond orbital analysis of benzo and anthraquinodimethane derivatives. *Pharmaceutical and Biological Evaluations*. 2018;5(2): 27. <https://doi.org/10.26510/2394-0859.pbe.2018.04>
65. Abbas T., Bendjeddou A., Villemin D. Molecular structure, NBO analysis, first hyper polarizability, and homo-lumo studies of π -extended tetrathiafulvalene (EXTTF) derivatives connected to π -nitro phenyl by density functional method. *International Journal of Advanced Chemistry*. 2018;6(1): 114. <https://doi.org/10.14419/ijac.v6i1.11126>
66. Obot I., Macdonald D., Gasem Z. Density functional theory (DFT) as a powerful tool for designing new organic corrosion inhibitors. Part 1: An overview. *Corrosion Science*. 2015;99: 1–30. <https://doi.org/10.1016/j.corsci.2015.01.037>
67. Khan M. U., Khalid M., Asim S., ... Imran M. Exploration of nonlinear optical properties of triphenylamine-dicyanovinylene coexisting donor- π -acceptor architecture by the modification of π -conjugated linker. *Frontiers in Materials*. 2021;8: 719971. <https://doi.org/10.3389/fmats.2021.719971>
68. Al-Shamiri H. A. S., Sakr M. E. M., Abdel-Latif S. A., ... Elwahy A. H. M. Experimental and theoretical studies of linear and non-linear optical properties of novel fused-triazine derivatives for advanced technological applications. *Scientific Reports*. 2022;12(1): 19937. <https://doi.org/10.1038/s41598-022-22311-z>

Информация об авторах

Хдир Ахмед Осман, магистр наук (органическая химия), преподаватель кафедры химии факультета науки и здравоохранения, Университет Кой (Курдистан, Ирак).

<https://orcid.org/0000-0002-7763-2976>
khdr.ahmed@koyauniversity.org

Юсиф Хусейн Азиз, магистр наук (материаловедение), преподаватель кафедры физики Университета Халабджи (Ирак).

<https://orcid.org/0000-0001-5357-7856>
yousif.husain@uoh.edu.iq

Резаз Анвар Омер, доктор наук (органическая химия), заведующий кафедрой химии факультета науки и здравоохранения, Университет Кой (Курдистан, Ирак).

<https://orcid.org/0000-0002-3774-6071>
rezaz.anwar@koyauniversity.org

Резаз Обейд Карим, магистр наук (общая физика), преподаватель кафедры физики факультета естественных наук физического факультета, Университет Халабджи (Курдистан, Ирак).

<https://orcid.org/0000-0001-6273-1309>
rezaz.kareem@uoh.edu.iq

Поступила в редакцию 16.12.2023; одобрена после рецензирования 14.03.2024; принята к публикации 15.03.2024; опубликована онлайн 25.06.2024.

Перевод на русский язык Дымант Юлии Александровны