Министерство образования и науки
Российской Федерации
Федеральное государственное
бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Тверской государственный университет»

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ ИЗУЧЕНИЯ КЛАСТЕРОВ, НАНОСТРУКТУР И НАНОМАТЕРИАЛОВ

МЕЖВУЗОВСКИЙ СБОРНИК НАУЧНЫХ ТРУДОВ

выпуск 8

ТВЕРЬ 2016

УДК 620.22:544+621.3.049.77+539.216.2:537.311.322: 530.145
ББК Ж36:Г5+В379
Ф50

Рецензент сборника:
Кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физики конденсированного состояния Тверского государственного университета
Н.Н. Большакова

Рецензирование статей осуществляется на основания Положения об рецензировании статей и материалов для опубликования в Межвузовском сборнике научных трудов «Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов».

Официальный сайт издания в сети Интернет:
www.physchemaspects.ru

Ф50 Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов [Текст]: межвуз. сб. науч. тр. / под общей редакцией В.М. Самсонова, Н.Ю. Сдобнякова. – Тверь: Твер. гос. ун-т, 2016. – Вып. 8. – 448 с.

ISBN 978-5-7609-1161-2
Зарегистрирован Федеральной службой по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций, свидетельство о регистрации СМИ ПИ № ФС 7747789 от 13.12.2011

Сборник составлен из оригинальных статей теоретического и экспериментального характера, отражающих результаты исследований в области изучения физико-химических процессов с участием кластеров, наноструктур и наноматериалов физики, включая межфазные явления и нанотермодинамику. Сборник предназначен для научных и инженерно-технических работников, преподавателей ВУЗов, студентов и аспирантов. Издание подготовлено на кафедре общей физики Тверского государственного университета.

УДК 620.22:544+621.3.049.77+539.216.2:537.311.322: 530.145
ББК Ж36:Г5+В379
ISBN 978-5-7609-1161-2
ISSN 2226-4442

УДК 574:539.1.04

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРОЕНИЯ ЭСТРОН СОДЕРЖАЩИХ БИСФУЛЛЕРЕНОЛОВЫХ РАДИОНУКЛИДНЫХ АГЕНТОВ ТЕРАПИИ ОНКОЛОГИЧЕСКИХ ЗАБОЛЕВАНИЙ

Е.А. Дикусар[1], А.Л. Пушкарчук[1], Т.В. Безъязычная[1], А.Г. Солдатов[2], С.А. Кутень[3]
[1]ГНУ «Институт физико-органической химии НАН Беларуси»
220072, Республика Беларусь, Минск, ул. Сурганова, д. 13
dikusar@ifoch.bas-net.by
[2] ГО «Научно-практический центр НАН Беларуси по материаловедению»
220072, Республика Беларусь, Минск, ул. П. Бровки, д. 19
[3]НИУ «Институт ядерных проблем» Белорусского государственного университета
220030, Республика Беларусь, Минск, ул. Бобруйская, д. 11

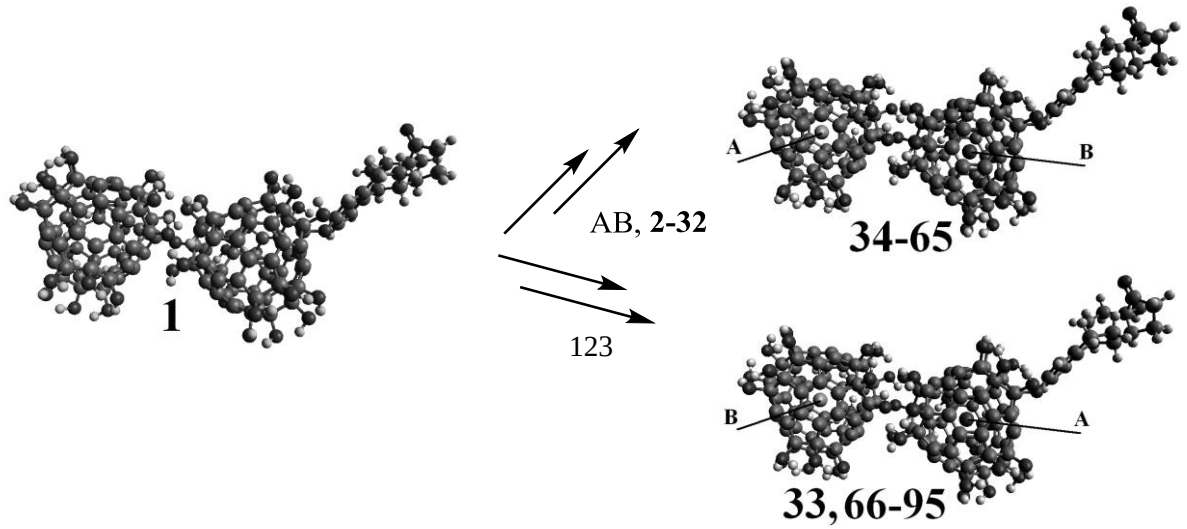
Аннотация: В данной работе проведено DFT-моделирование строения и электронной структуры, содержащих эстрон бисфуллереноловых радионуклидных агентов терапии онкологических заболеваний.

Ключевые слова: DFT-моделирование электронной структуры, эстрон, бисфуллереноловые кластеры, агенты-истребители опухолевых новообразований.

С целью терапевтического уничтожения онкологических новообразований обычно применяют химиотерапию или лучевую терапию [1], а в изотопной медицине – используют введение в опухоль соответствующих короткоживущих радионуклидов (Fe^{59}, Y^{90}, Zr^{95}, In^{114*}, Eu^{147}, Eu^{148}, Eu^{155}, Tm^{170}, Re^{188}, Po^{210}, Rn^{222}, U^{230}, Pu^{237}, Cm^{240}, Cm^{241}, Es^{253}), бинарная (или нейтронозахватная) – технология, разработанная для избирательного воздействия на злокачественные новообразования и использующая тропные к опухолям препараты, содержащие нерадиоактивные нуклиды (B^{10}, Cd^{113}, Gd^{157} и др.) [2], и триадная – последовательное введение в организм комбинации из двух и более, по отдельности неактивных и безвредных компонентов, тропных к опухолевым тканям и способных в них селективно накапливаться или вступать друг с другом в химическое взаимодействие и уничтожать опухолевые новообразования под действием определенных сенсибилизирующих внешних воздействий [3].

Ранее [4, 5] мы сообщали о моделировании бисфуллереновых и бисфуллереноловых эндоэдрических радионуклидных кластерных систем, содержащих щелочные металлы (Li, Na, K, Rb, Cs, Fr) и галогены (F, Cl, Br, I, At). В данном сообщении представлены результаты квантово-химического DFT-моделирования [6] строения и электронной структуры бисфуллереноловых эндоэдрических радионуклидных кластерных систем, изученных с целью разработки новых радионуклидных наноразмерных агентов-истребителей опухолевых новообразований [7-12]. Для повышения эффективности данных препаратов перспективным является

введение в состав их молекул структурных фрагментов природного происхождения, например – эстрона [13, 14] (см. рис. 1, 2).



A – отсутствует, $B = Rn$ (**2, 33**); A – отсутствует, $B = Rn$ (**2, 34**); $A = B = Rn$ (**2, 35**); $AB = LiF$ (**3, 36, 66**); *LiCl* (**4, 37, 67**); *LiBr* (**5, 38, 68**); *LiI* (**6, 39, 69**); *LiAt* (**7, 40, 70**); *NaF* (**8, 41, 71**); *NaCl* (**9, 42, 72**); *NaBr* (**10, 43, 73**); *NaI* (**11, 44, 74**); *NaAt* (**12, 45, 75**); *KF* (**13, 46, 76**); *KCl* (**14, 47, 77**); *KBr* (**15, 48, 78**); *KI* (**16, 49, 79**); *KAt* (**17, 50, 80**); *RbF* (**18, 51, 81**); *RbCl* (**19, 52, 82**); *RbBr* (**20, 53, 83**); *RbI* (**21, 54, 84**); *RbAt* (**22, 55, 85**); *CsF* (**23, 56, 86**); *CsCl* (**24, 57, 87**); *CsBr* (**25, 58, 88**); *CsI* (**26, 59, 89**); *CsAt* (**27, 60, 90**); *FrF* (**28, 61, 91**); *FrCl* (**29, 62, 92**); *FrBr* (**30, 63, 93**); *FrI* (**31, 64, 94**); *FrAt* (**32, 65, 95**) (A – металл, B – галоген).

Рис. 1. Предполагаемая схема построения эндоэдрических бакминстерфуллереноловых кластеров $A@C_{60}(OH)_{23}OC_{60}(OH)_{22}OEstron@B$ (**34-65**) и $B@C_{60}(OH)_{23}OC_{60}(OH)_{22}OEstron@A$ (**33, 66-95**).

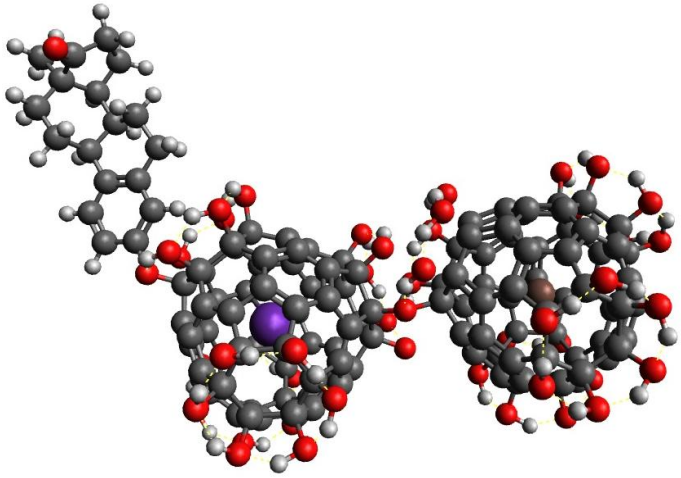


Рис. 2. DFT-модель эндоэдрического эстронсодержащего кластера $At@C_{60}(OH)_{23}OC_{60}(OH)_{22}OEstron@Rb$ (**85**).

Были проведены неэмпирические квантово-химические расчеты соединений (**1-27, 33-60, 66-90**) с использованием метода DFT с

применением уровня теории B3LYP1/MIDI с использованием программного пакета GAMESS [15] и базисного набора MIDI [16]. В процессе расчетов проводили полную оптимизацию всех геометрических параметров до достижения минимумов полных электронных энергий. Полные энергии систем, вычисленные методом DFT для соединений (**1-27, 33-60, 66-90**), и дипольные моменты приведены в Таблице 1. Необходимость предварительных исследований по моделированию такого рода объектов (**33-95**) обусловлена очень высокой трудоемкостью, стоимостью и сложностью их практической реализации [17].

Таблица 1. Полные энергии систем (E, а.е.м.) и дипольные моменты (D, Дб) соединений (**1-27, 33-60, 66-90**)

№	E	D	№	E	D	№	E	D
1	-8856,1214270463	2,65	**33**	-30669,1181623784	2,70	**60**	–37603,5699683134	33,45
2	-21813,0447589198	0	**34**	-30669,1177885347	2,85	**66**	–8962,8396251661	23,95
3	-106,7003851739	0,32	**35**	-52482,1146781222	2,86	**67**	–9321,5907735895	28,69
4	-465,5302923213	8,42	**36**	-8962,8345685969	25,45	**68**	–11427,5531477964	29,36
5	-2571,4873906670	9,53	**37**	-9321,5894895556	29,00	**69**	–15762,2920437995	29,34
6	-6906,2411696398	9,90	**38**	-11427,5512332384	30,91	**70**	–30077,8032497433	29,31
7	-21221,7700714697	9,90	**39**	-15762,2901420093	30,81	**71**	–9116,7065321625	22,47
8	-260,5353049103	6,52	**40**	-30077,8009611907	32,81	**72**	–9475,4572522998	27,27
9	-619,3761608306	9,13	**41**	-9116,7004787050	24,90	**73**	–11581,4195187956	27,93
10	-2725,3373191808	10,37	**42**	-9475,4549427232	29,39	**74**	–15916,1584277430	27,92
11	-7060,0925727661	10,80	**43**	-11581,4168879763	30,45	**75**	–30231,6696559565	27,87
12	-21375,6214854562	10,86	**44**	-15916,1558151526	30,39	**76**	–9552,5929851367	25,73
13	-696,3995963709	7,68	**45**	-30231,6669873347	30,29	**77**	–9911,3446251980	30,54
14	-1055,2543501855	11,20	**46**	-9552,5880389659	27,83	**78**	–12017,3069467332	31,20
15	-3161,2207349841	12,94	**47**	-9911,3433900020	31,70	**79**	–16352,0458006056	31,20
16	-7495,9785289096	13,66	**48**	-12017,3052179759	33,31	**80**	–30667,5570764563	31,16
17	-21811,5088909353	14,02	**49**	-16352,0441674054	33,24	**81**	–11884,1612747753	26,07
18	-3027,9638343238	8,08	**50**	-30667,5553328017	33,08	**82**	–12242,9129363436	30,80
19	-3386,8216551602	11,92	**51**	-11884,1564051225	28,19	**83**	–14348,8753114037	31,48
20	-5492,7898598444	13,84	**52**	-12242,9118486122	31,91	**84**	–18683,6142042227	31,48
21	-9827,5483478994	14,67	**53**	-14348,8737122350	33,62	**85**	–32999,1254017001	31,44
22	-24143,0791829652	15,12	**54**	-18683,6126194163	33,54	**86**	–16488,6067901779	26,18
23	-7632,4087303342	8,78	**55**	-32999,1237959633	33,38	**87**	–16847,3585920461	30,88
24	-7991,2718587494	13,08	**56**	-16488,6021852884	28,29	**88**	–18953,3209655871	31,57
25	-10097,2437532871	15,06	**57**	-16847,3576448504	31,94	**89**	–23288,0599040543	31,55
26	-14432,0028264439	16,06	**58**	-18953,3195215634	33,71	**90**	–37603,5714002469	31,46
27	-28747,5341337105	16,72	**59**	-23288,0584824063	33,59			

Квантово-химическое моделирование позволяет сделать выводы об устойчивости и возможности существования бакминстерфуллереноловых кластеров $A@C_{60}(OH)_{23}OC_{60}(OH)_{22}OEstron@B$ (**34-65**) и $B@C_{60}(OH)_{23}OC_{60}(OH)_{22}OEstron@A$ (**33-60, 66-90**), распределении в них электронной плотности. Из данных квантово-химических расчетов следует (см. Таблицу 2), что энергия взаимодействия E_{ie} эндоэдрических кластеров (**32-56**), полученная по формуле (**I**):

$$E_{ie(33,34,...,90)} = E_{(33,34,...,90)} - \left[E_{(1)} + E_{(2,3,...,27)} \right] \quad (1)$$

показывает, что термодинамическая устойчивость [17-20] эндоэдрических бакминстерфуллереноловых кластерных систем C_{60} (**37-40, 42-45, 47-50, 52-55, 57-60, 67-70, 72-75, 77-80, 82-85, 87-90**) на $\sim 82-238$ кДж/моль ниже, чем устойчивость систем, состоящих из «пустых» бакминстерфуллереноловых кластеров C_{60} (**1**) и изолированных недиссоциированных молекул галогенидов щелочных металлов *MHal* (**4-7, 9-12, 14-17, 19-22, 24-27**).

Таблица 2. Оценка энергии взаимодействия E_{ie} эндоэдрических бакминстерфуллереноловых кластеров $A@C_{60}(OH)_{23}OC_{60}(OH)_{22}OEstron@B$ (**33-60**) и $B@C_{60}(OH)_{23}OC_{60}(OH)_{22}OEstron@A$ (**66-90**)

№	E_{ie}, а.е.м. (Хартри)	E_{ie}, кДж/моль	№	E_{ie}, а.е.м. (Хартри)	E_{ie}, кДж/моль	№	E_{ie}, а.е.м. (Хартри)	E_{ie}, кДж/моль
33	0,0480235877	126,09	**51**	-0,0711437524	-186,79	**74**	0.0555720694	145.90
34	0,0483974314	127,07	**52**	0,0312335943	82,00	**75**	0.073256546	192.34
35	0,0962667637	252,75	**53**	0,0375746557	98,65	**76**	–0.0719617195	–188.94
36	-0,0127563767	-33,49	**54**	0,0571555294	150,06	**77**	0.0311520338	81.79
37	0,062229812	163,38	**55**	0,0768140482	201,68	**78**	0.0352152972	92.46
38	0,0575844749	151,19	**56**	-0,0720279079	-189,11	**79**	0.0541553503	142.18
39	0,0724546768	190,23	**57**	0,0356409453	93,58	**80**	0.0732415253	192.30
40	0,0905373253	237,71	**58**	0,04565877	119,88	**81**	–0.0760134052	–199.57
41	-0,0437467484	-114,86	**59**	0,0657710839	172,68	**82**	0.0301458629	79.15
42	0,0426451537	111,96	**60**	0,0855924434	224,72	**83**	0.035975487	94.45
43	0,0418582508	109,90	**66**	-0,0178129459	-46,77	**84**	0.055570723	145.90
44	0,0581846598	152,76	**67**	0,0609457781	160,01	**85**	0.0752083114	197.46
45	0,0759251678	199,34	**68**	0,0556699169	146,16	**86**	–0.0766327974	–201.20
46	-0,0670155487	-175,95	**69**	0,0705528866	185,24	**87**	0.0346937496	91.09
47	0,0323872298	85,03	**70**	0,0882487727	231,70	**88**	0.0442147463	116.09
48	0,0369440545	97,00	**71**	-0,0498002059	-130,75	**89**	0.0643494359	168.95
49	0,0557885505	146,47	**72**	0,0403355771	105,90	**90**	0.0841605099	220.96
50	0,0749851799	196,87	**73**	0,0392274315	102,99			

Для фторидов $A@C_{60}(OH)_{23}OC_{60}(OH)_{22}OEstron@F$ (**36, 41, 46, 51, 56**) и $F@C_{60}(OH)_{23}OC_{60}(OH)_{22}OEstron@A$ (**66, 71, 76, 81, 86**) полученные данные не столь однозначны, что связано с возникновением ковалентных связей $C-F$ внутри бакминстерфуллерноловых сфер этих соединений. Их устойчивость оказалась выше исходных компонентов на $\sim 33-201$ кДж/моль. Устойчивость изомерных супрамолекулярнх кластерных систем (**37-40, 42-45, 47-50, 52-55, 57-60**) ниже на $\sim 3-7$ кДж/моль по сравнению с (**67-70, 72-75, 77-80, 82-85, 87-90**), а фторсодержащих (**36, 41, 46, 51, 56**) ниже $\sim 12-13$ кДж/моль по сравнению с (**66, 71, 76, 81, 86**). Радонсодержащие кластеры (**33-35**) на

~126 – 253 кДж/моль менее устойчивы, чем составляющие их изолированные компоненты (**1, 2**).

Таблица 3. Радиусы ионов M^+, Hal^- [5, 6, 15] и их арифметическая сумма (*S*), нм*

Радиус ионов, нм, M^+, Hal^- и их сумма (S)		F^-	Cl^-	Br^-	I^-	At^-
		0,133	0,184	0,196	0,220	0,227
Li^+	0,076	0,209	0,260	0,272	0,296	0,303
Na^+	0,102	0,235	0,286	0,298	0,322	0,329
K^+	0,138	0,271	0,322	0,334	0,358	0,365
Rb^+	0,152	0,285	0,336	0,348	0,372	0,379
Cs^+	0,167	0,300	0,351	0,363	0,387	0,394
Fr^+	0,180	0,313	0,364	0,376	0,400	0,407

*Ван-дер-Ваальсовый радиус внутренних полостей бакминстерфуллеренола (**1**) равен 0,355 нм.

Таблица 4. Расчеты методом DFT длин связей в солях *MHal* (3-32) (*L*), нм

	F^-	Cl^-	Br^-	I^-	At^-
Li^+	0,166	0,219	0,236	0,260	0,273
Na^+	0,197	0,241	0,256	0,280	0,293
K^+	0,240	0,283	0,298	0,322	0,337
Rb^+	0,259	0,301	0,315	0,340	0,355
Cs^+	0,279	0,321	0,353	0,361	0,378
Fr^+	0,322*	0,349*	0,364*	0,383*	0,395*

*Длины связей $Fr-Hal$ (**28-32**), рассчитаны методом молекулярной механики [20].

Таблица 5. Сумма атомных номеров элементов в солях *MHal* (3-32) (*N*)

№	*N*	№	*N*	№	*N*
3	12	**4**	20	**5**	38
6	56	**7**	88	**8**	20
9	28	**10**	46	**11**	64
12	96	**13**	28	**14**	36
15	54	**16**	72	**17**	104
18	46	**19**	54	**20**	72
21	90	**22**	122	**23**	64
24	72	**25**	90	**26**	108
27	140	**28**	96	**29**	104
30	122	**31**	140	**32**	172

Была проведена прямая экстраполяция полученных данных E_{ie} для соединений (**36-65, 66-95**) относительно следующих величин: арифметической суммы входящих в их состав ионов (M^+, Hal^-) − *S* (см. Таблицу 3), рассчитанных методом DFT длин связей в солях *MHal* (**3-32**) *L* (см. Таблицу 4) и арифметической суммы атомных номеров входящих в их состав элементов *N* (см. Таблицу 5) [4]. Путем прямой экстраполяции имеющихся данных, представленных в Таблицах 1-5 и на

рис. 3-5, с использованием значений L для длин связей $Fr-Hal$ (**28-32**), рассчитанных методом молекулярной механики [20] (см. Таблицу 4), была проведена приблизительная оценка энергии взаимодействия E_{ie} эндоэдрических францийсодержащих кластеров (**61-65, 91-95**), полученных с применением экстраполяционных формул (**2-14**) (см. Таблицу 6).

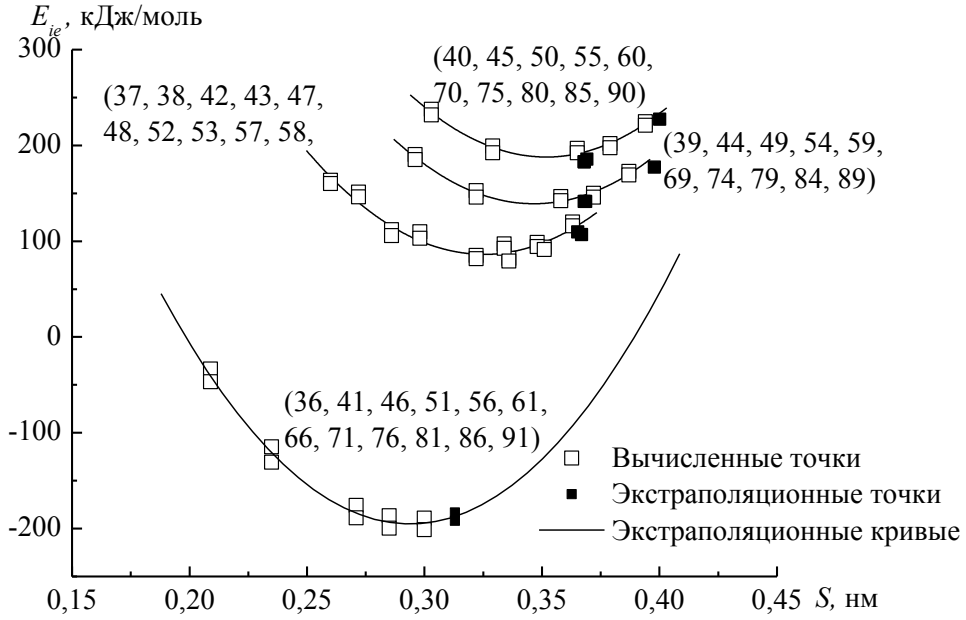


Рис. 3. Зависимость E_{ie} кластеров от суммы ионных радиусов S.

Экстраполяционные многочлены $E_{ie}(S)$ для **(36, 41, 46, 51, 56, 61, 66, 71, 76, 81, 86, 91):**

$$E_{ie} = 1654,6684 - 12589,8586x + 21421,3009x^2, \quad (2)$$

для **(39, 44, 49, 54, 59, 69, 74, 79, 84, 89):**

$$E_{ie} = 2418,6213 - 13155,7737x + 18979,6295x^2, \quad (3)$$

для **(40, 45, 50, 55, 60, 70, 75, 80, 85, 90):**

$$E_{ie} = 2598,47846 - 13707,45363x + 19484,77679x^2, \quad (4)$$

для **(37, 38, 42, 43, 47, 48, 52, 53, 57, 58):**

$$E_{ie} = 2098,6492 - 12374,9228x + 19021,50453x^2. \quad (5)$$

Таблица 6. Оценка энергии взаимодействия францийсодержащих кластеров

№	$E_{ie}(S)$	$E_{ie}(L)$	$E_{ie}(N)$
61, 91	-190.39; -181.13	-163.75; -143.87	45.8; 49.4
62, 92	114.7 – 191.6	116.98 – 193.34	164.3 – 582.6
63, 93	119.03 – 190.06	138.09 – 211.76	127.01 – 418.6
64, 94	187.9 – 228.04	169.09 – 237.81	219.87 – 438.85
65, 95	204.26 – 248.23	197.38 – 258.02	–

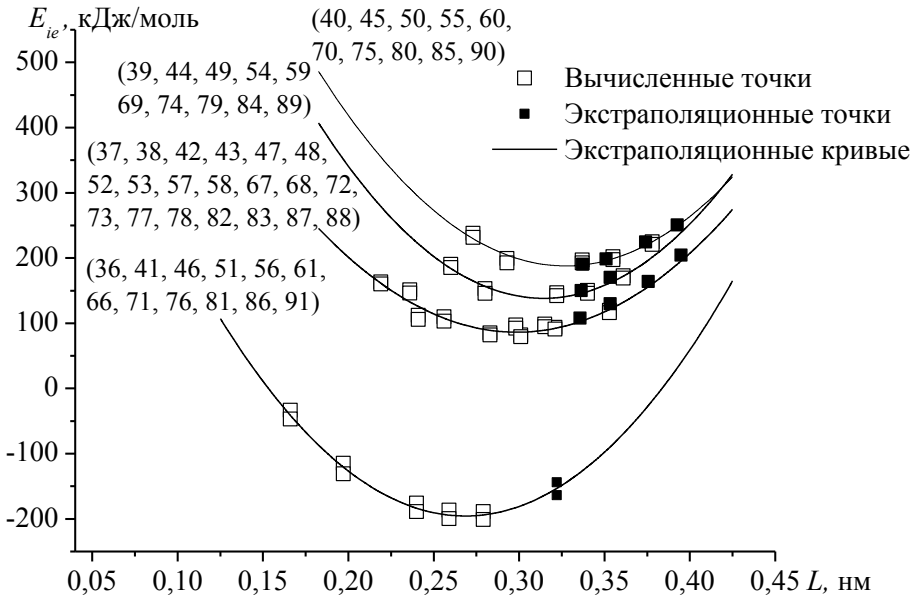


Рис. 4. Зависимость E_{ie} кластеров от расчетных длин связей L.

Экстраполяционные многочлены $E_{ie}(L)$ для **(37, 38, 42, 43, 47, 48, 52, 53, 57, 58, 67, 68, 72, 73, 77, 78, 82, 83, 87, 88)**:

$$E_{ie} = 1139,25383 - 7050,44776x + 11801.49742x^2, \quad (6)$$

для **(39, 44, 49, 54, 59, 69, 74, 79, 84, 89):**

$$E_{ie} = 1669,8326 - 9747,35585x + 15508,59896x^2, \quad (7)$$

для **(40, 45, 50, 55, 60, 70, 75, 80, 85, 90):**

$$E_{ie} = 1715,27043 - 9336,89228x + 14269,61043x^2, \quad (8)$$

для **(36, 41, 46, 51, 56, 61, 66, 71, 76, 81, 86, 91):**

$$E_{ie} = 865,17542 - 7903,50205x + 14721,0677x^2. \quad (9)$$

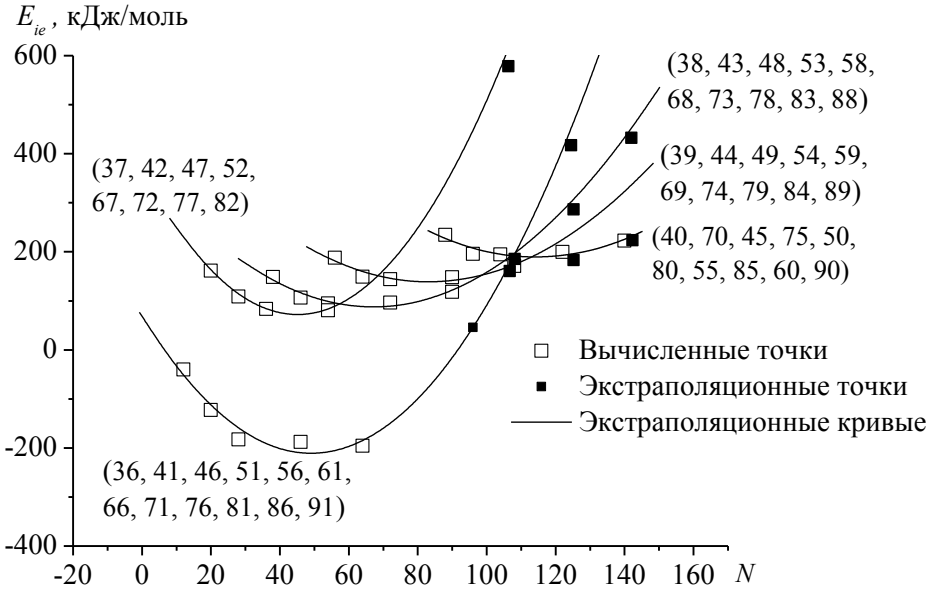


Рис. 5. Зависимость E_{ie} кластеров от суммы атомных номеров элементов *N*.

Экстраполяционные многочлены $E_{ie}(N)$ для **(40, 45, 50, 55, 60, 70, 75, 80, 85, 90):**

$$E_{ie} = 905,15539 - 12,53211x + 0,05484x^2, \quad (10)$$

для **(39, 44, 49, 54, 59, 69, 74, 79, 84, 89):**

$$E_{ie} = 534,24245 - 9,51388x + 0,05716x^2, \quad (11)$$

для **(38, 43, 48, 53, 58, 68, 73, 78, 83, 88):**

$$E_{ie} = 378,89734 - 8,7128x + 0,06497x^2, \quad (12)$$

для **(37, 42, 47, 52, 67, 72, 77, 82):**

$$E_{ie} = 363,93792 - 13,06209x + 0,14482x^2, \quad (13)$$

для **(36, 41, 46, 51, 56, 61, 66, 71, 76, 81, 86, 91):**

$$E_{ie} = 67,47989 - 11,44106x + 0,11654x^2. \quad (14)$$

Таким образом, эстронсодержащие бисфуллереноловые радионуклидные агенты терапии онкологических заболеваний – соединения (**33-95**) могут оказаться перспективны для разработки на их основе нанокапсулированных радионуклидных агентов терапии онкологических заболеваний. Из полученных данных об устойчивости бисфуллереновых кластеров (**33-60, 66-90**) можно сделать вывод о возможности их практической реализации.

Библиографический список:

1. **Mayles, P.** Handbook of radiation therapy physics: theory and practice / P. Mayles, A. Nahum, J.C. Rosenwald. – Taylon & Francis, 2007. – 1450 p.
2. **Hosmane, N.S.** Boron and gadolinium neutron capture therapy for cancer treatment / N.S. Hosmane, J.A. Maquire, Y. Zhu. – World Scientific Publ. Co. Pte. Ltd., 2012. – 300 p.
3. **Vorst, A.V.** RF/Microwave interaction with biological tissues / A.V. Vorst, A. Rosen, Y. Kotsuka. – Wiley-IEEE Press, 2006. – 344 p.
4. **Дикусар, Е.А.** Квантово-химическое проектирование эндоэдрических бисбакминстерфуллереновых кластерных систем для разработки нанокапсулированных радионуклидных агентов терапии онкологических заболеваний / Е.А. Дикусар, А.Л. Пушкарчук, В.И. Поткин и др. // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов: межвуз. сб. науч. тр. / под общей редакцией В.М. Самсонова, Н.Ю. Сдобнякова. – Тверь: Твер. гос. ун-т, 2015. – Вып. 7. – С. 193-207.
5. **Дикусар, Е.А.** Квантово-химическое проектирование эндоэдрических бакминстерфуллереновых кластерных систем для создания радионуклидных агентов терапии онкологических заболеваний / Е.А. Дикусар, В.М. Зеленковский, А.Л. Пушкарчук и др. // Вестник фармации. – 2015. – № 4 (70). – С. 51-59.
6. **Ghosh, S.K.** Concepts and methods in modern theoretical chemistry. Atoms, molecules and clusters / S.K. Ghosh, P.K. Chattaraj. – CRC Press, 2013. – 856 p.
7. **Dikusar, E.A.** Quantum chemical designing of endohedral containing Po^{210} derivatives of buckminsterfullerene $C_{60} - C_{80}$ for development of radionuclide nanosized agents for cancer therapy / E.A. Dikusar, V.M. Zelenkovskii, A.L. Pushkarchuk et al. // Nonlinear

dynamics and applications: proceedings of the 21-th annual seminar (NPCS'2014), Minsk, Belarus, 20-23 May 2014; ed. by L.F. Babichev, V.I. Kuvshinov, V.V. Shaparau.– Minsk: State Scientific Institution «The Joint institute for power and nuclear research – SOSNY», 2014. − V. 20. − P. 50-55.

8. **Dikusar, E.A.** Quantum-chemistry projecting of the radio-nuclide carborane and fullerene nano-cluster agents for diagnostics and therapy of oncological diseases / E.A. Dikusar, V.M. Zelenkovski, V.I. Potkin et al**.** // Proceedings of international conference nanomeeting – 2013. Physics, chemistry and application of nanostructures. Reviews and short notes, Minsk, Belarus, 24-27 May 2013; ed. V.E. Borisenko, S.V. Gaponenko, V.S. Gurin, C.H. Kam. – Minsk: World Scientific Publishing Co, 2013. − P. 324-327.

9. **Dikusar, E.** Quantum chemical simulation of the structure of carborane and endohedral buckminsterfullerene derivatives / E. Dikusar, V. Zelenkovski, V. Potkin et al. // Nonlinear phenomena in complex systems. − 2011. − V. 14. − № 4. − P. 356-362.

10. **Dikusar, E.A.** Fullerene nano-cluster as agents for diagnostics and therapy of oncological diseases / E.A. Dikusar, A.L. Pushkarchuk, V.M. Zelenkovski et al. // 5th International Symposium «Methods and Applications of Computational Chemistry»: Book of Abstracts, Kharkiv, Ukraine, 1-5 July 2013. – Kharkiv, 2013. – P. 99.

11. **Dikusar, E.** Quantum chemical simulation of the structure of the endohedral buckminsterfullerene derivatives / E. Dikusar, V. Potkin, V. Zelenkovskii et al. // Fundamental and applied nanoelectromagnetics (FANEM'12). 25th anniversary of the Research Institute for Nuclear Problems BSU, Minsk, Belarus, 22-25 May 2012: Conference Proceedings. − Minsk: Belarussian State University, 2012. − P. 15.

12. **Dikusar, E.A.** Quantum-chemical modeling of endohedral derivatives of buckminsterfullerenes $Gd@C_{60}(CHR)_2$ and $Gd@C_{80}(CHR)_2$ / E.A. Dikusar, V.M. Zelenkovski, V.I. Potkin, A. A. Yudzin // Theoretical and experimental chemistry. − 2010. − V. 46. – I. 4. − P. 213-217.

13. **Grimes, R.N.** Carboranes / R.N. Grimes. – 2nd ed. − Amsterdam, Boston, Heidelberg, London, New York, Oxford, Paris, San Diego, San Francisco, Singapore, Sydney, Tokyo: Academic Press, 2011. − 1139 p.

14. Estrogens: biochemistry, therapeutic uses and physiological effects / ed. V.J. Thompson and E. Watson. − USA-Texas: Nova Science Publishers, 2012. − 153 p.

15. **Shmidt, M.W.** General atomic and molecular electronic structure system / M.W. Shmidt, K.K. Baldridge, J.A. Boatz et al. // Journal of Computational Chemistry. – 1993. – V. 14. – № 7. – P. 1347-1363.

16. **Huzinaga, S.** Gaussian basis sets for molecular calculations / S. Huzinaga, J. Andzelm, M. Klobukowski. – Amsterdam: Elsevier, 1984. – 340 p.

17. **Orlova, M.A.** Perspective of fullerene derivatives in PDT and radiotherapy of cancers / M.A. Orlova, T.P. Trofimova, A.P. Orlov, O.A. Shatalov // British Journal of Medicine & Medical Research. – 2013. – V. 3. – № 4. – P. 1731-1756.

18. **Sandler, S.I.** Chemical, biochemical, and engineering thermodynamics / S.I. Sandler. − John Wiley & Sons., Inc., 2006. − 760 p.

19. **Demerel, Y.** Nonequilibrium thermodynamics: Transport and rate processes in physical, chemical and biological systems / Y. Demerel. − 3rd ed. – Amsterdam, Oxford: Elsevier Science, 2014. − 792 p.

20. **Хельтье, Х.-Д.** Молекулярное моделирование: теория и практика / Х.-Д. Хельтье, В. Зиппль, Д. Роньян, Г. Фолькерс. – М.: Лаборатория знаний, 2010. – 318 с.