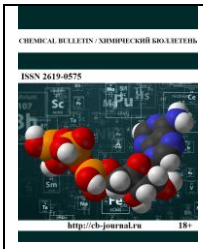

Научно-исследовательский журнал ***«Chemical Bulletin»***
https://cb-journal.ru
2025, Том 8, № 4 / 2025, Vol. 8, Iss. 4 https://cb-journal.ru/archives/category/publications
Научная статья / Original article
УДК 615.91: 544. 18
DOI: 10.58224/2619-0575-2025-8-4-4

Квантово-химическое моделирование водных растворов иприта

[1] Будко Е.В. *,
[1] Ямпольский Л.М.,
[1] Разинькова Е.М.,
[1] Курский государственный медицинский университет Минздрава России,
** Ответственный автор E-mail: budkoev@kursksmu.net*

Аннотация: *цель: провести квантово–химическое моделирование молекулы сернистого иприта в водной среде в режиме встроенного параметра и в режиме добавленных молекул. После оптимизации по термодинамическим параметрам изучить возможные молекулярно-структурные изменения иприта в составе среды.*

Методы. Для построения и визуализации структуры молекулы сернистого иприта, его взаимодействия с водной средой применен программный пакет Gaussian с визуализатором GaussView. Для проведения расчета (calculation tipe FREQ) избраны стандартные методы Gaussian ab initio – Хартли-Фок (RHF) и пост Хартли-Фок (MP2), которые чередовали с расчетами по теории денситной функции (DFT): B3LYP и B3LYP-FC. В качестве граничного фактора использован полуэмпирический метод RPM6.

Результаты. Показано, что только комплексный анализ состояния молекулы позволяет выявить удельный вклад каждого из типов взаимодействий в структуру и свойства молекулы. В водной среде молекула иприта обладает высоким потенциалом устойчивости, однако воздействие реального молекулярного окружения приводит к изменению поляризуемости, заряда на атомах и вектора дипольного момента, причем в возбужденном состоянии молекулы одна из связей C_1 - Cl_1 максимально активируется, практически удваивая свою длину..

Выводы. Несмотря на очень плохую растворимость иприта в воде, его межмолекулярное взаимодействие со средой ведет к перераспределению энергетических характеристик и формирование неравновесного поляризуемого состояния молекулы иприта в структуре аквакомплекса, возможной дальнейшей деструкции с формированием токсичных продуктов, в том числе ониевых катионов. Дальнейшее развитие полученных результатов позволит обосновать выбор условий, направленной активации молекулы иприта для целей детоксикации в водных средах и жидкостях организма.

Ключевые слова: *вода, сернистый иприт, квантово-химическое моделирование, поляризация, дипольный момент, диэлектрическая проницаемость среды*

Для цитирования: Будко Е.В., Ямпольский Л.М., Разинькова Е.М. Квантово-химическое моделирование водных растворов иприта // Chemical Bulletin. 2025. Том 8. № 4. 4. DOI: 10.58224/2619-0575-2025-8-4-4

Поступила в редакцию: 14 июля 2025 г.; Одобрена после рецензирования: 1 сентября 2025 г.; Принята к публикации: 2 ноября 2025 г.

Quantum chemical modeling of aqueous mustard gas solutions

[1] Budko E.V. *,
[1] Yampolsky L.M.,
[1] Razinkova E.M.,
[1] Kursk State Medical University of the Ministry of Health of the Russian Federation,
** Corresponding author E-mail: budkoev@kursksmu.net*

Abstract: *objective: to conduct quantum chemical modeling of a sulfur mustard molecule in an aqueous medium in the built–in parameter mode and in the mode of added molecules. After optimization by thermodynamic parameters, to study possible molecular and structural changes of mustard gas in the composition of the medium.*

Methods. The Gaussian software package with the GaussView visualizer was used to construct and visualize the structure of the sulfur mustard molecule and its interaction with the aquatic environment. To carry out the calculation (calculation tipe FREQ), the standard Gaussian ab initio – Hartley-Fock (RHF) and post-Hartley-Fock (MP2) methods were chosen, which alternated with calculations based on the theory of the density function (DFT): B3LYP and B3LYP-FC. The semiempirical RPM6 method is used as a boundary factor.

Results. It is shown that only a comprehensive analysis of the state of the molecule makes it possible to identify the specific contribution of each type of interaction to the structure and properties of the molecule. In an aqueous environment, the mustard gas molecule has a high stability potential, but exposure to a real molecular environment leads to a change in polarizability, atomic charge, and dipole moment vector, and in the excited state of the molecule, one of the C1-Cl1 bonds is maximally activated, practically doubling its length.

Conclusions. Despite the very poor solubility of mustard gas in water, its intermolecular interaction with the medium leads to a redistribution of energy characteristics and the formation of a nonequilibrium polarizable state of the mustard molecule in the structure of the aquacomplex, possible further destruction with the formation of toxic products, including onium cations. Further development of the obtained results will make it possible to justify the choice of conditions for targeted activation of the mustard gas molecule for detoxification in aqueous media and body fluids.

Keywords: *water, sulfur mustard gas, quantum chemical modeling, polarization, dipole moment, dielectric constant of the medium*

For citation: Budko E.V., Yampolsky L.M., Razinkova E.M. Quantum chemical modeling of aqueous mustard gas solutions. Chemical Bulletin. 2025. 8 (4). 4. DOI: 10.58224/2619-0575-2025-8-4-4

The article was submitted: June 14, 2025; Approved after reviewing: September 1, 2025; Accepted for publication: November 2, 2025.

Введение

Состояние среды определяет и направляет все происходящие в ней явления природы. Проведение ее направленных структурных изменений позволяет таргетно менять направления течения процессов, их интенсивность, энергию активации и т.п. Стихийная структурная коррекция среды, возникающая в результате хозяйственной деятельности человека, вирусных и бактериальных инвазии, иных внешних воздействий часто ведет к необратимым изменениям генеральных процессов, оказывающих существенное воздействие на состояние физических тел и характер метаболических преобразований. Такая тенденция представляет опасность разрушения элементов среды обитания и, может быть, одним из путей, ведущих к ее гибели.

Отличительная особенность воздействия человека на природу в разрушительности и необратимости, невозможности компенсации воздействия за счет ресурсов биосферы [1], что соответствует представлениям В.И. Вернадского. В процессе ликвидации химических отравляющих веществ большие количества иприта были затоплены в водах мирового океана [2], поэтому проблема его детоксикации, как одного из наиболее токсичных, разрушительных факторов среды обитания, становится актуальной, требующей системного решения [3].

Анализ физико-химических свойств иприта, изучение особенностей его взаимодействия с водой показал, что, несмотря на плохую растворимость, иприт при определенных условиях подвержен гидролизу [4], причем продукты реакции – тиодигликоли (рис. 1), сами по себе устойчивы и токсичны. Процесс сопровождается смещением pH в кислую сторону, идет через формирование углерод центрированных радикалов – ониевых катионов [5], которые благодаря их алкилирующей активности становятся непосредственной причиной токсического воздействия на живые ткани [6].

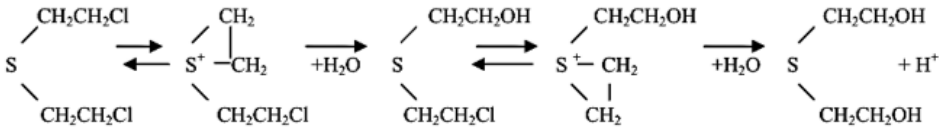

Рис. 1. Схема гидролиза сернистого иприта (по [7]).
Fig. 1. Scheme of sulfur mustard gas hydrolysis (according to [7]).

В качестве мер борьбы с загрязнением окружающей среды ипритом предлагается изменение интенсивности природных процессов: повышение температуры придонной воды; увеличение щелочности морской и иловой вод [8]; стимулирование деятельности штаммов микроорганизмов, толерантных к отравляющим веществам [9]; регулирование окислительно-восстановительного потенциала на границе «вода – донные осадки» [10] и другие. Однако, столь кардинальные меры чреваты не менее существенным и сложно предсказуемым влиянием на саму среду обитания.

Актуальной становится превентивная разносторонняя оценка состояния анализируемого вещества, выполненная в формате квантово-химического моделирования взаимодополняющими методами при учете воздействия различных сред на структурную модель [11, 12]. Очевидно, что для решения данной проблемы методика квантово–химического моделирования должна включать в себя сочетание подходов от чисто теоретических до полуэмпирических. Такая алгоритмизация позволит выявить объективные причины реакционной способности в различных экспериментальных условиях и молекулярно-ионные механизмы токсичности в природных объектах и живых организмах. Отсюда, целью данного исследования является квантово–химическое моделирование состояния иприта в различных средах, изучение его возможных молекулярно-структурных изменений в составе среды, как главного фактора, определяющего скачкообразный рост его реакционной активности в водных системах различной сложности. Модельное представление о молекуле иприта необходимо для понимания ее способности видоизменяться в различных средах, поиска средств подавления ее токсической активности, возможного применения в качестве базы для разработки лекарственных средств, как, например, азотистый иприт, ставший основой для разработки противоопухолевых препаратов.

Материалы и методы исследований

Для построения и визуализации структуры сернистого иприта, его взаимодействия с водной средой применен программный пакет Gaussian [13] с визуализатором GaussView. Для проведения расчета (calculation tipe FREQ) избраны стандартные методы программы Gaussian ab initio – Хартли-Фок (RHF) и пост Хартли-Фок (MP2), которые чередовали с расчетами по теории денситной функции (DFT): B3LYP и B3LYP-FC. В качестве граничного фактора использован полуэмпирический метод RPM6.

Таблица 1

Характеристики программных методов расчета.

Table 1

Characteristics of software calculation methods.

метод расчета	RHF	RMP2	RB3LYP	RB3LYP-fc	RPM6
тип расчёта	FREQ	FREQ	FREQ	FOPT	FOPT
базис	3-21G	3-21G	3-21G	3-21G	ZDO

Воздействие растворителя учитывали в режиме встроенного параметра solvatation.

Результаты и обсуждения

В данном исследовании приведены результаты расчета состояния молекулы иприта в водной среде с использованием квантово – химического подхода, алгоритмизированного нами ранее [14] в сопоставлении с результатами расчета модельной молекулы (без учета среды). На рис. 2 представлены визуализированные конструкции молекулы иприта: оптимизированная геометрически для установления порядка исчисления атомов углерода (модель) (рис. 2А), оптимизированная методом RPM6 в условиях изоляции (модель) (Б) и в водной среде (В).

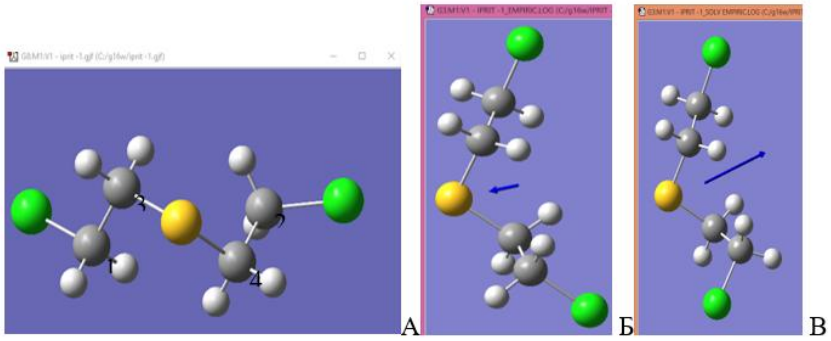

Рис. 2. Принятая в статье нумерация атомов для описания структуры иприта на исходной геометрической модели (А). Геометрия и вектор дипольного момента иприта при оптимизации методом RPM6 без учета влияния среды (Б); в среде «вода» в режиме встроенного параметра solvatation (В).
Fig. 2. The numbering of atoms used in the article to describe the structure of mustard gas based on the initial geometric model (A). The geometry and vector of the dipole moment of mustard gas during RPM6 optimization without taking into account the influence of the medium (B) in the "water" medium in the mode of the built-in solvation parameter (C).

В соответствии с представлениями RPM6 (метод полуэмпирический, лимитирован существующими экспериментальными данными) молекула иприта в условиях изоляции (модельные условия, аналог состояния в газовой фазе) (рис. 2Б), обладает сравнительно слабой полярностью с небольшим дипольным моментом (синяя стрелка), направленным к атому серы. При этом молекула достаточно симметрична относительно центрального атома серы. На визуализации строения иприта в воде (рис. 2В) вектор дипольного момента направлен от серы и увеличен, что говорит об усилении поляризации на фоне деформации структуры. Дипольный момент иприта в воде получен методами с различной степенью вовлечения электронов: их значения 3 Debye по Хартли-Фок (только ковалентные взаимодействия) и 11 Debye при расчетах с применением теории DFT с функционалом B3LYP-FC (распределенная электронная плотность с переходом в возбужденное состояние). Так как подобные расчеты для газовой фазы дали однотипное направление дипольного момента к атому серы, очевидно, что данные процессы происходят под влиянием молекул среды.

Для подробной иллюстрации влияния водной среды на строение иприта для молекулы в изолированных условиях и для аналогичной частицы в воде нами проведено сопоставление результатов расчетов длин связей, углов между ними (табл. 3), зарядов на атомах (рис 4), а также, параметров энергии, дипольного момента, поляризации и энтропии (рис. 5). В качестве алгоритма использована последовательность методов Хартли-Фок (RHF), пост Хартли-Фок (RMP2), группа методов DFT с использованием функционала RB3LYP и RB3LYP-FC, для сравнения приняты исходная геометрически оптимизированная модель, в качестве граничного, полуэмпирический метод RPM6. Роль среды выражена через параметр «solvation=water».

Таблица 3

Изменения расстояния (А) и углов между атомами (Б) при смене метода расчета при оптимизации структуры иприта в режиме встроенного параметра solvatation.

Table 3

Changes in the distance (A) and angles between atoms (B) when changing the calculation method for optimizing the mustard gas structure in the mode of the built-in solvation parameter.

метод расчета	исходная геометрия	RPM6	RHF	RMP2	RB3LYP	RB3LYP-fc
тип расчёта		FREQ	FREQ	FREQ	FREQ	FOPT
базис		ZDO	3-21G	3-21G	3-21G	3-21G
	Расстояния между атомами					
C1-Cl 1	1,76	1,808	1,926	1,931	1,940	3,552
C1-C3	1,54	1,507	1,51	1,518	1,510	1,42

Продолжение таблицы 3
Continuation of Table 3

C3-S	1,78	1,816	1,89	1,911	1,900	2,048
C4-S	1,78	1,814	1,885	1,906	1,900	1,925
C2-C4	1,54	1,509	1,51	1,52	1,512	1,49
C2-Cl 2	1,76	1,809	1,914	1,918	1,920	1,941
	углы между связями					
Cl1-C1-C3	109,4	111,200	108,4	110,54	108,000	82,8
C3-S-C4	109,4	104,700	100,6	98,95	100,200	101,56
Cl2-C2-C4	109,4	107,880	108,4	108,67	108,000	107,08

Согласно методу RPM6 молекула иприта, на первый взгляд, сохраняет симметричность длин связей. Однако, потенциальная возможность увеличения длины связи C_1-Cl_1 по отношению к геометрической оптимизации (рис. 3А) и другим неравным связям в молекуле иприта определяется возможностью перераспределения электронной плотности в результате межмолекулярного взаимодействия с молекулами воды при образовании более равновесной структуры гидрата. Отметим активность связи C_1-Cl_1 в возбужденном состоянии, большую, чем у остальных связей потенциальную способность к распределению электронов для построения аквакомплекса (длина связи увеличивается вдвое в возбужденном состоянии(B3LYP-FC)). При этом, длины связей C_3-C_1 и C_4-C_2 стабильны, что говорит об устойчивости структуры этих радикалов.

Применение метода RHF, интерпретирующего молекулярные связи, как сумму одноэлектронных частиц, позволяет понять «удлиняющую» роль ковалентных гетероатомных связей относительно геометрической модели, что отражает влияние молекул среды. Далее, методы пост Хартли-Фок (RMP2), группа методов DFT с использованием функционала RB3LYP показывают последовательное увеличение длины связей с учетом распределенной электронной плотности. Значит, атомы все дальше друг от друга и все ближе к молекулам среды. Но это не касается связей C_3-C_1 и C_4-C_2, формирующих устойчивые радикалы со стабильными короткими связями равными модельным, что говорит об их устойчивости и не взаимодействии со средой (рис. 3А). Происходит снижение энергетической выгоды (прочности) гетероатомных связей при постоянстве поляризации атомов; значение зарядов на атомах относительно метода RHF и метода RMP2 остаются постоянными для модели иприта и для интерпретации молекулы в водной среде, что говорит о перераспределении молекулами воды заряда на атоме (при удлинении связи) до модельной нормы. Сопоставление состояния модельной молекулы иприта и ее водной интерпретации с позиции метода B3LYP показывает, что для модели постоянство зарядов на атомах сохраняется в то время, как, для молекулы в водной среде делокализованное распределение электронной плотности ведет к удлинению гетерополярных связей на фоне снижения заряда на Cl_1 до уровня C_1, что говорит об усилении взаимодействия атома хлора 1 с водной средой (рис. 4), как результат удлинения связи. Еще большее снижение заря да имеет место в возбужденном состоянии (B3LYP-FC) (рис. 4), при котором происходит увеличение практически вдвое длины связи $C_1 – Cl_1$, что говорит о ее высокой лабильности и наличии электронного делокализационного потенциала для взаимодействия с молекулами воды. При переходе в возбужденное состояние за счет активизации распределенной электронной плотности одновременно с двукратным ростом длины связи C_1-Cl_1 существенно изменяется величина угла Cl_1-C_1-C_3. При этом, длина связи C_2-$C1_2$ в тех же условиях меняется не существенно, что говорит о ее большей прочности, т.е. более низком гидротационном потенциале.

Аналогично можно сказать о связях C_3-S и C_4-S, в которых, так же, как и у связей C_2-$C1_2$ и C_1-$C1_1$ в большей степени превалирует ковалентное взаимодействие с присутствием делокализованной электронной плотности. При этом, потенциал перехода в возбужденное состояние у C_3-S несколько больше, чем у C_4-S, исходя из длин их связей в возбужденном состоянии (рис. 3) при постоянстве значений зарядов (рис. 4). Прочность (устойчивость) связей C_1-C_3 и C_2-C_4, в водной среде указывает на активность молекулы иприта только по одной связи C_1-Cl_1, что объясняет ее относительно малую растворимость в воде. Данный вывод коррелирует с визуализацией (рис. 2В), отражающей структурную неравнозначность участков C_3-C_1-$C1_1$ и C_4-C_2- $C1_2$.

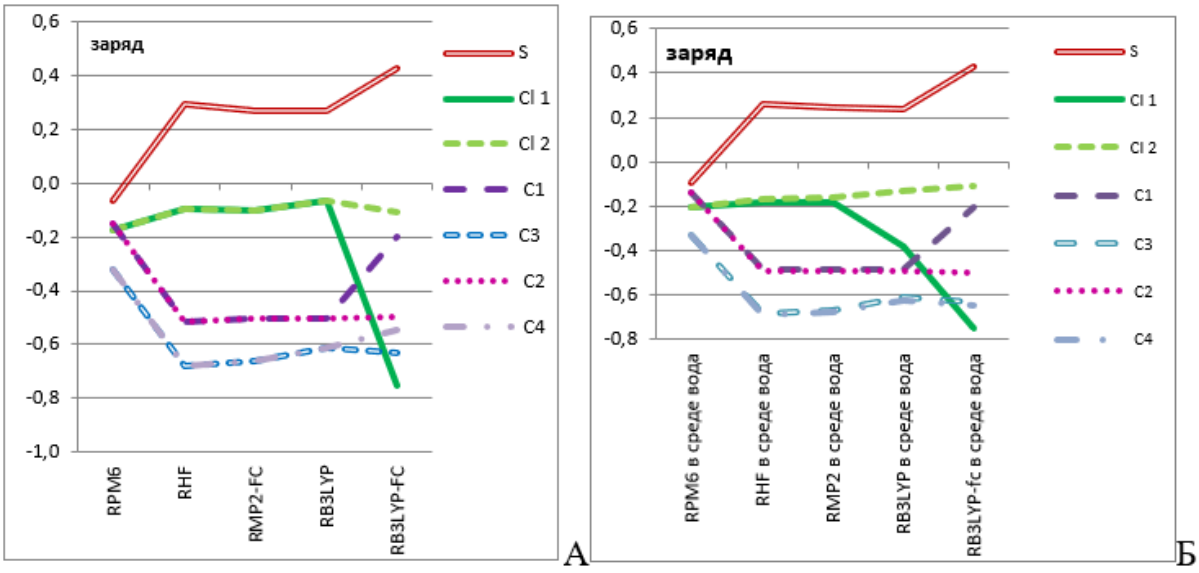

Рис. 3. Изменения заряда на атомах иприта в модельной (газовой) (А) и водной (Б) средах (в режиме встроенного параметра solvatation) с применением RHF, RPM2, RB3LYP, RB3LYP-FC, RPM6 методов расчета.
Fig. 3. Charge changes on mustard gas atoms in model (gas) (A) and aqueous (B) media (in the mode of the built-in solvation parameter) using RHF, RPM2, RB3LYP, RB3LYP-FC, RPM6 calculation methods.

Еще большее удлинение гетероатомных связей энергетически не выгодно в н.у. К тому же, комплексное сопоставление молекулярных связей, как продукта ковалентного и электронно-распределенного взаимодействия (B3LYP) показывает, что равные между собой по зарядам, т.е., энергетике связей, атомы хлора в водной среде существенно отличаются: заряд Cl_1 существенно растет за счет электронного перераспределения, становится похож на C_3 и C_4, что ведет к дополнительной поляризации связи именно с этим хлором, в то время как $C1_2$ достаточно стабилен. Поляризация Cl_1 проявляется в приросте длины связи при переходе к гибридным методам. Перераспределение электронной плотности приводит к формированию относительно независимых участков: атом серы, углеродные структуры и атомы хлора.

Присутствие молекул воды, выступающих в качестве лигандирующих элементов среды, вносит свои коррективы в распределение электронной плотности. Отсюда расхождение результатов теоретических методов с полуэмпирическим RPM6, что означает существование некоего фактора существенно повышающего устойчивость молекулы иприта согласно рис. 3 (сокращение длин связей гетероатомов, по сравнению с расчетными методами RHF, MP2, B3LYP), снижающего, при данном наборе атомов и порядке их соединения, степень поляризации молекулы иприта в водной среде, означает рост симметрии молекулы, т.е. ее устойчивости.

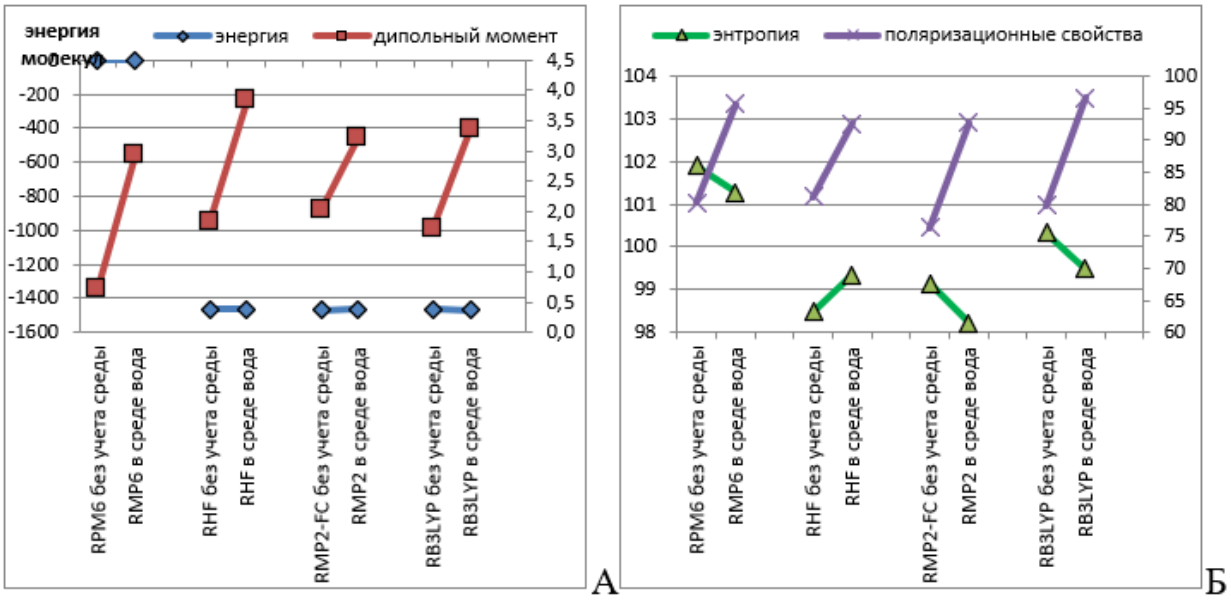

Рис. 4. Изменение энергии молекулы, дипольного момента (А), энтропии и поляризационных свойств (Б) при смене метода расчета в безводных и водных системах (в режиме встроенного параметра solvatation).
Fig. 4. Changes in the energy of a molecule, the dipole moment (A), entropy, and polarization properties (B) when changing the calculation method in anhydrous and aqueous systems (in the mode of the built-in solvation parameter).

При расчете теоретическими методами RHF, MP2, B3LYP величина суммарной энергии молекулы иприта постоянна не зависимо от присутствия среды (рис. 4А) и достаточно низка. Учет эмпирических данных с применением метода RPM6, показал более высокое значение энергии, причем, судя по рис. 4А, наличие среды в этом случае не принципиально. Происходит перераспределение электронной плотности в собственно молекулярных структурах. С водой, в качестве среды молекула иприта практически не взаимодействует. Поэтому она менее устойчива: ее энергия выше, чем расчетная методами RHF, MP2, B3LYP, исходя из типов связей и распределения электронной плотности (рис. 4А).

В тоже время, в молекуле иприта в водной среде распределение энергий по молекулярным связям (как функции длины) неравномерно в отличие от модельной. Значит, равенство молекулярных энергий модельного иприта и молекулы в среде связано с компенсацией неравенства энергий связей межмолекулярным взаимодействием со средой с образованием, по меньшей мере, аквакомплекса. В самом деле, отдельные связи в молекуле в водной среде менее устойчивы чем остальные. Речь идет о связи (C_1-Cl_1) (рис. 2А), которая в водной среде существенно удлиняется. При этом, остальные связи деформируются не столь существенно, а формирующие радикал структуры, наоборот, полностью сохраняются (рис. 3). В условиях RPM6 (рис.4) молекула достаточно симметрична, устойчива, не активна. В тоже время, суммарный дипольный момент молекулы в среде вода несколько повышается, что говорит о росте ее поляризации. При этом, снижается энтропия в водных растворах, что говорит о формировании устойчивой структуры иприт-вода (аквакомплекса).

Таким образом, молекула иприта в водной среде существенно изменяет свои структурно – энергетические характеристики созданием аквакомплекса за счет деформирующихся гетероатомных связей и полярных молекул воды, что, в целом, формирует энергетически устойчивую равновесную структуру на уровне модельной молекулы, что определяет ее реакционную инертность в данных условиях.

Однако, эффект взаимодействия иприта со средой внутренне напряжен. Растет дипольный момент молекулы по сравнению с модельным. Но он ниже расчетных методами RHF, MP2, B3LYP, что показывает иную, чем внутримолекулярные взаимодействия, причину устойчивости молекулы иприта в водной среде. Процесс образования аквакомплекса энергетически выгоден, и энтропия снижается. При этом, степень поляризации растет до уровня метода B3LYP, что показывает участие распределенной электронной плотности в формировании структурного взаимодействия со средой (через удлиненные гетероатомные связи), пониженного уровня симметрии, увеличенного ди-

польного момента. Величины зарядов на атомах практически не меняются, следовательно, изменение длин связей определяет взаимодействие с молекулами среды и деформация связей молекулы иприта происходит именно под их влиянием.

Выводы

Таким образом, несмотря на геометрическую симметрию модельной молекулы иприта, в водной среде одно ее крыло (C_3-C_1-$C1_1$) значительно более поляризовано, энергетически активно, обладает более высоким дипольным моментом, чем другое (C_4-C_2-$C1_2$), причем максимальная активность концентрируется на одной связи C_1-$C1_1$, что объясняет сравнительно малую растворимость и низкую реакционную способность иприта в водной среде. Длина связи C_1-Cl_1 в водной среде в невозбужденном состоянии определяется в основном ковалентным взаимодействием, однако резервная распределенная электронная плотность способна обеспечить дополнительную активность молекуле в водной среде за счет увеличения длины связи в возбужденном состоянии практически вдвое с существенным повышением химической активности. По сути, речь идет о частичном перераспределении электронной плотности иприта на молекулы среды, что и определяет возникновение аквакомплексов. Исходя из высокой общей энергии молекулы, достаточно высокого уровня энтропии и симметрии, при относительно небольшом приросте дипольного момента и поляризации можно сделать вывод об общем повышении энергетики раствора при участии в нем иприта, что менее энергетически выгодно и, как следствие, снижает его растворимость и химическую активность. Однако, определенное изменение строения и под воздействием водной среды способно существенно изменить характеристики раствора и инициировать тот или иной химический процесс.

Упорядоченное применение теоретических методов RHF, RPM2, RB3LYP, RB3LYP-FC позволяют рассчитывать молекулу в среде, в то время как метод RPM6, ограниченный эмпирическими параметрами, представляет молекулу как сольватированный комплекс, что и объясняет меньшую длину связей по сравнению с чисто расчетными методами. Сопоставление всех указанных методов друг с другом и с экспериментальными данными позволяет получать информацию о структуре молекулы иприта и ее реакционной способности через оценку распределенной электронной плотности, оценить вклад каждой из электронных структур в составе молекулы, активность среды.

Несмотря на очень плохую растворимость иприта, водная среда ведет к установлению нового равновесия с молекулой при перераспределении взаимных энергетических характеристик и повышении степени взаимодействия через рост поляризуемости. Дальнейшее развитие расчетов позволит обосновать выбор условий, направленно активирующих молекулу иприта для целей детоксикации.

Список источников

1. Азаренко Е.В., Гончаренко Ю.Ю., Дивизинюк М.М., Ковач В.Е. Варианты построения систем экологического мониторинга морских захоронений боевых отравляющих веществ // Техногенно-экологическая безопасность и Гражданская защита. 2014. № 7. С. 12 – 25.

2. Mazurek M., Witkiewicz Z., Popiel S., Śliwakowski M. Capillary gas chromatography – atomic emission spectroscopy – mass spectrometry analysis of sulphur mustard and transformation products in a block recovered from the Baltic Sea // Journal of Chromatography. 1 June, 2001. Vol. 919. Issue 1. P. 133 – 145. doi.org/10.1016/S0021-9673(01)00672-0

3. Hanaoka S., Nomura K., Wada T. Determination of mustard and lewisite related compounds in abandoned chemical weapons (Yellow shells) from sources in China and Japan // Journal of Chromatography. 6 January, 2006. Vol. 1101. Issues 1-2. P. 268 – 277. doi.org/10.1016/j.chroma.2005.10.028

4. Medvedeva N., Polyak Yu., Kuzikova I., Orlova O., Zharikov G. The effect of mustard gas on the biological activity of soil // Environmental Research. March, 2008. Vol. 106. Issue 3. P. 289 – 295 doi.org/10.1016/j.envres.2007.04.003

5. Корнякова В.В., Ашвиц И.В., Муратов В.А. К вопросу о механизме действия иприта // Образовательный вестник «Сознание». 2017. № 8. С. 26 – 33.

6. Шефер Т.В. Патогенетические основы медикаментозной коррекции ранних проявлений острого резорбтивного действия ипритов. Развитие концепции эндотоксикоза: специальность 14.03.04 "Токсикология": автореф. дис. … докт. медиц. наук. Санкт-Петербург, 2015. 22 с.

7. Орлова О.Г. Взаимодействие микроорганизмов с продуктами гидролиза иприта: автореф. дис. ... канд. биолог. наук. Санкт-Петербург, 2007. 20 с.

8. Иванов А.И., Саломатин Г.Б., Скобанева О.В. Проблема экологической реабилитации акватории озера Моховое, загрязнённой продуктами деструкции отравляющих веществ в окрестностях поселка Леонидовка Пензенской области // Теоретическая и прикладная экология. 2012. № 4. С. 25 – 28.

9. Зайцева Т.Б., Медведева Н.Г. Влияние продуктов гидролиза иприта на развитие массовых видов циано- бактерий // Принципы экологии. 2017. № 1 (22). С. 70 – 80.

10. Тявловская Т.М., Тамело В.Ф. Научно-практические аспекты очистки водоемов от боевых отравляющих веществ // Наука и техника. 2011. № 4. С. 48 – 51.

11. Klawohn S., Darby J.P., Kermode J.R. and all. Gaussian approximation potentials: Theory, software implementation and application examples Open Access // The Journal of Chemical Physics. 2023. Vol. 159. № 17. doi.org/10.1063/5.0160898

12. Thomas du Toit D.F., Zhou Y., Deringer V.L. Hyperparameter optimization for atomic cluster expansion potentials //Journal of Chemical Theory and Computation. 2024. Vol. 20. № 22. P. 10103 – 10113.

13. Montgomery Jr J.A. et al. A complete basis set model chemistry. VI. Use of density functional geometries and frequencies // The Journal of chemical physics. 1999. Vol. 110. № 6. P. 2822 – 2827.

14. Будко Е.В., Ямольский Л.М., Сенченко Н.В. Иприт: особенности структуры. Квантово–химическое моделирование // Вода: химия и экология. 2025. № 6. С. 20 – 27.

References

1. Azarenko E.V., Goncharenko Yu.Yu., Divizinyuk M.M., Kovach V.E. Options for constructing environmental monitoring systems for marine burial sites of chemical warfare agents. Technogenic and environmental safety and civil defense. 2014. No. 7. P. 12 – 25.

2. Mazurek M., Witkiewicz Z., Popiel S., Śliwakowski M. Capillary gas chromatography – atomic emission spectroscopy – mass spectrometry analysis of sulphur mustard and transformation products in a block recovered from the Baltic Sea. Journal of Chromatography. 1 June, 2001. Vol. 919. Issue 1. P. 133 – 145. doi.org/10.1016/S0021-9673(01)00672-0

3. Hanaoka S., Nomura K., Wada T. Determination of mustard and lewisite related compounds in aban-doned chemical weapons (Yellow shells) from sources in China and Japan. Journal of Chromatography. 6 January, 2006. Vol. 1101. Issues 1-2. P. 268 – 277. doi.org/10.1016/j.chroma.2005.10.028

4. Medvedeva N., Polyak Yu., Kuzikova I., Orlova O., Zharikov G. The effect of mustard gas on the biological activity of soil. Environmental Research. March, 2008. Vol. 106. Issue 3. P. 289 – 295 doi.org/10.1016/j.envres.2007.04.003

5. Kornyakova V.V., Ashvits I.V., Muratov V.A. On the mechanism of action of mustard gas. Educational Bulletin "Consciousness". 2017. No. 8. P. 26 – 33.

6. Shefer T.V. Pathogenetic foundations of drug correction of early manifestations of acute resorptive action of mustard gas. Development of the concept of endotoxicosis: specialty 14.03.04 "Toxicology": author's abstract. diss. … doctor of medical sciences. St. Petersburg, 2015. 22 p.

7. Orlova O.G. Interaction of microorganisms with mustard gas hydrolysis products: author's abstract. diss. ... Cand. Biology. St. Petersburg, 2007. 20 p.

8. Ivanov A.I., Salomatin G.B., Skobaneva O.V. The Problem of Ecological Rehabilitation of Lake Mokhovoye Waters Polluted by Degradation Products of Toxic Substances in the Vicinity of Leonidovka Settlement, Penza Region. Theoretical and Applied Ecology. 2012. No. 4. P. 25 – 28.

9. Zaitseva T.B., Medvedeva N.G. The Influence of Mustard Gas Hydrolysis Products on the Development of Common Cyanobacteria Species. Principles of Ecology. 2017. No. 1 (22). P. 70 – 80.

10. Tyavlovskaya T.M., Tamelo V.F. Scientific and Practical Aspects of Cleaning Reservoirs from Chemical Warfare Agents. Science and Technology. 2011. No. 4. P. 48 – 51.

11. Klawohn S., Darby J.P., Kermode J.R. and all. Gaussian approximation potentials: Theory, software implementation and application examples Open Access. The Journal of Chemical Physics. 2023. Vol. 159. No. 17. doi.org/10.1063/5.0160898

12. Thomas du Toit D.F., Zhou Y., Deringer V.L. Hyperparameter optimization for atomic cluster expansion potentials.Journal of Chemical Theory and Computation. 2024. Vol. 20. No. 22. P. 10103 – 10113.

13. Montgomery Jr J.A. et al. A complete basis set model chemistry. VI. Use of density functional geometries and frequencies. The Journal of chemical physics. 1999. Vol. 110. No. 6. P. 2822 – 2827.

14. Budko E.V., Yamolsky L.M., Senchenko N.V. Mustard gas: structural features. Quantum-chemical modeling. Water: chemistry and ecology. 2025. No. 6. P. 20 – 27.

Информация об авторах

Будко Е.В., доктор фармацевтических наук, профессор, заведующая кафедрой общей и биоорганической химии, ORCID ID: https://orcid.org/0000-0001-8861-7491, SPIN-код 1517-2863, Курский государственный медицинский университет Министерства здравоохранения Российской Федерации, 305041, г. Курск, ул. К. Маркса, д. 3, budkoev@kursksmu.net

Ямпольский Л.М., кандидат химических наук, доцент, ORCID ID: https://orcid.org/0000-0001-7575-9140, Курский государственный медицинский университет Министерства здравоохранения Российской Федерации, 305041, г. Курск, ул. К. Маркса, д. 3, yampolsky.leonid@yandex.ru

Разинькова Е.М., Курский государственный медицинский университет Министерства здравоохранения Российской Федерации, 305041, г. Курск, ул. К. Маркса, д. 3, katryshaa@mail.ru

Information about the authors

Budko E.V., Doctor of Pharmaceutical Sciences, Professor, Head of the Department of General and Bioorganic Chemistry, ORCID ID: https://orcid.org/0000-0001-8861-7491, SPIN code 1517-2863, Kursk State Medical University of the Ministry of Health of the Russian Federation, 3 K. Marksa St., Kursk, 305041, budkoev@kursksmu.net

Yampolsky L.M., Candidate of Chemical Sciences, Associate Professor of the Department of General and Bioorganic Chemistry, ORCID ID: https://orcid.org/0000-0001-7575-9140, Kursk State Medical University of the Ministry of Health of the Russian Federation, 3 K. Marksa St., Kursk, Kursk Region, 305041, K. Marksa St., 3, yampolsky.leonid@yandex.ru

Razinkova E.M., Kursk State Medical University, Ministry of Health of the Russian Federation, 305041, Kursk Region, Kursk, K. Marksa St., 3, katryshaa@mail.ru