

**УДК** 539.1, 539.2, 537.56, 537.533.74  
**PACS** 34.80.Dp, 34.80.Gs, 34.80.Kw  
**DOI** 10.24144/2415-8038.2020.47.103-111

Ш. Ш. Демеш<sup>1\*</sup>, О. В. Васильєв<sup>2</sup>, Е. Ю. Ремета<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Інститут ядерних досліджень (АТОМКИ), 4026, Дебрецен, Угорщина

<sup>2</sup>Інститут електронної фізики НАН України, 88017, Ужгород, вул. Університетська, 21, Україна,  
 e-mail: demessanyi@gmail.com; remetoveyu@gmail.com; vasyliov.oleksandr.1996@gmail.com

\* Present address: Normandie University Le Havre, LOMC-UMR 6294 CNRS, 53 rue de Prony, BP 540,  
 76058 Le Havre, France

## ОПИС ПРОЦЕСУ ОДНОКРАТНОЇ ІОНІЗАЦІЇ СКЛАДНИХ МОЛЕКУЛ

Викладено методику дослідження перерізів процесу однократної іонізації складних молекул електронним ударом. Наведено аналітичні вирази для повних перерізів цього процесу, що використовують у відомих наближеннях – BED, BEB, формула Гризінського. Описано аналітичну апроксимацію цих перерізів за відповідними формулами. Розраховано потенціал іонізації та перерізи іонізації молекули глутаміну електронним ударом.

**Ключові слова:** переріз, іонізація, наближення, апроксимація, молекула, глутамін.

### Вступ

Дослідження фізико-хімічних процесів взаємодії різних біомолекул з електронами малих та великих енергій в останні роки є актуальною задачею [1–4]. Дуже важливіми тут є біофізичні і біохімічні наслідки викликані цими процесами у структурі молекул та у клітинах організмів. Різноманітні процеси збудження-дезбудження, іонізації-рекомбінації, різні механізми дисоціації-асоціації та випромінювання молекул зумовлені саме взаємодією з електронами, як зовнішнього так і внутрішнього опромінювання. Вкрай потрібною є інформація про характеристики елементарних процесів взаємодії амінокислот, які є складовими макромолекул ДНК, РНК і білків, з низькоенергетичними електронами. Деяким з цих характеристик є такі: енергетичні пороги перебігу тих чи інших реакцій; енергії зв'язків у молекулах; енергії появи нейтральних і заряджених фрагментів при дисоціації; перерізи збудження, іонізації та пружного розсіювання; ймовірності випромінювання ліній у широкому діапазоні довжин хвиль.

У роботі [1] виміряні абсолютні вели-

чини повних та парціальних перерізів іонізації таких біомолекул як аденін і гуанін електронним ударом при енергіях від порогів до 200 eV. У роботі [2] для молекул глутаміну та глутамінової кислоти у газовій фазі експериментально досліджено їх фрагментацію електронним ударом та виміряно потенціали їх іонізації. У теоретичній роботі [3] розраховано характеристики структури амінокислот треоніну, глутаміну, глутамінової кислоти, лейцину та ізолейцину, а у [4] розраховано перерізи однократної іонізації амінокислот урацилу, тиміну, цитозину, аденіну, гуаніну. У циклі (див., наприклад, [5–7]) експериментальних робіт систематично досліджено мас-спектри, отримані при фрагментації таких амінокислот як: гліцин, метіонін, аспарагін, триптофан, пролін, аланін, валін, глутамін.

В даній роботі наводяться наближення та формули за якими проводять розрахунки процесу іонізації складних молекул електронами. Характеристики структури молекули глутаміну були розраховані у наближеннях теорії функціоналу густини (ТФП) і Хартрі-Фока (ХФ). У якості прикладу наводяться розрахунки потенціалу іонізації та пе-

переріз однократної іонізації такої біомолекули як амінокислота глутамін ( $C_5H_{10}N_2O_3$ ).

## Модельний опис процесу іонізації

Для оцінки сумарних, по молекулярним орбіталям, перерізів однократної іонізації мо-

лекул використовують BED- та ВЕВ-моделі [8–10] і класичне наближення Грізінського [11]. З BED-моделі слідує такий вираз для перерізу іонізації електрона з молекулярної орбіталі:

$$\sigma_i(t) = \frac{S}{t + u + 1} \cdot \left\{ D(t) \cdot \ln t + \left(2 - \frac{N_i}{N}\right) \cdot \left[1 - \frac{1}{t} - \frac{\ln t}{t+1}\right] \right\} \quad (1)$$

$$D(t) \equiv \frac{1}{N} \cdot \int_0^{(t-1)/2} \frac{1}{\omega + 1} \cdot \frac{df(\omega)}{d\omega} d\omega \quad (2)$$

$$N_i \equiv \int_0^{\infty} \frac{df(\omega)}{d\omega} d\omega \quad (3)$$

З ВЕВ моделі вираз для перерізу іонізації електрона з молекулярної орбіталі дещо

спрощений та має вигляд:

$$\sigma_i(t) = \frac{S}{t + u + 1} \cdot \left\{ \frac{1}{2} Q \cdot \left(1 - \frac{1}{t^2}\right) \cdot \ln t + (2 - Q) \cdot \left[\left(1 - \frac{1}{t}\right) - \frac{\ln t}{t+1}\right] \right\} \quad (4)$$

Тут  $t = T/B$ ,  $T$  – кінетична енергія електрона, що налітає;  $B$  – енергія зв'язку електрона, що видаляється з молекулярної орбіталі;  $u = U/B$ , де  $U$  середня кінетична енергія електронів на молекулярній орбіталі;

Тут  $\omega = W/B$ , де  $W$  – кінетична енергія видаленого електрона,  $df(\omega)/d\omega$  – диференціальна сила осцилятора для молекули;  $N$  – число електронів на молекулярній орбіталі;  $R=13.6058$  eV стала Ридберга;  $a_0 = 5.2918 \cdot 10^{-11}$  м. – радіус Бора (атомна одиниця довжини). Величину  $Q$  вважають рівній 1 [8].

$$S = 4\pi \cdot a_0^2 \cdot N \cdot (R/B)^2 \quad (5)$$

$$Q = \frac{2 \cdot B \cdot M_i^2}{N \cdot R} \quad (6)$$

$$M_i^2 = \frac{R}{B} \cdot \int_0^{\infty} \frac{1}{\omega + 1} \cdot \frac{df(\omega)}{d\omega} d\omega \quad (7)$$

Вираз для перерізу іонізації електрона з певної молекулярної орбіталі в наближенні Грізінського має вигляд:

$$\sigma_i(t) = \frac{\sigma_0}{B^2} \cdot \frac{1}{t} \cdot \left(\frac{t-1}{t+1}\right)^{3/2} \cdot \left\{ 1 + \frac{2}{3} \cdot \left(1 - \frac{1}{2t}\right) \cdot \ln [2.7 + (t-1)^{1/2}] \right\} \quad (8)$$

де  $\sigma_0 = 6.56 \cdot 10^{-14} eV^2 \cdot cm^2$ . Переріз у цьому наближенні визначається тільки енергією зв'язку  $B$  електрона на молекулярній орбіталі.

Характеристики структури молекули глутаміну, необхідні для розрахунків у ВЕВ моделі - енергія зв'язку  $B$ ; середня кінетична енергія електронів  $U$  і число електронів  $N$  в іонізованій під оболонці – були розрахова-

ні в наближеннях ТФП і ХФ. Ці характеристики для L-форм молекул мають величини дуже близькі до аналогічних значень їх D-форм. Це призводить до того, що відповідні сумарні перерізи однократної іонізації майже збігаються (див. обговорення у [12]).

Потенціали іонізації молекул, які є порогами процесу іонізації, розраховують *ab initio*: або як різницю повних енергій ней-

тральної материнської молекули та її однократного йону (адиабатичне наближення), або за енергією зв'язку НОМО- і LUMO-орбіталей нейтральних молекул. Розрахунки геометричних і електронних структур молекули глутаміну та їх одноелектронних позитивних іонів були проведені з використанням програми GAUSSIAN [13] у двох наближеннях за методами ТФГ та ХФ. Для розрахунків перерізів використовуємо позначення ВЕВ-ТФП і ВЕВ-ХФ. Детальна методика аналогічних розрахунків описана у [14, 15]. Використовується стандартний гаусовий базовий набір Данінга типу aug-cc-pVDZ для обох методів розрахунків. Для методу ТФГ було застосовано обмінно-кореляційний функціонал типу V3LYP. Геометричні структури двох ізомерів (L- і D-) для молекули глутаміну та її позитивних іонів були оптимізовані за алгоритмом квадратичного наближення з програми GAUSSIAN. При обчисленні початкової геометрії молекул задавалися рівноважні міжатомні відстані з бази даних PubChem [16–18]. Повна енергія досліджуваних молекул була визначена для основних станів з синглетної мультиплетністю, а для їх однозарядних позитивних іонів з дублетною. Для спрощення обчислень коливну енергію атомів в молекулах у розрахунках не враховували. З огляду на те, що енергія іонізації визначається як різниця відповідних повних енергій атома і позитивного іона, внесок в неї від коливальної енергії молекул буде незначним.

Розрахована нами *ab initio* величина потенціалу іонізації для L- і D-форм (ізомери) молекули глутаміну така. У адиабатичному наближенні: (ТФП) 8.555 eV (D-молекула), 8.552 eV (L-молекула); (ХФ) 6.986 eV (D-молекула), 6.786 eV (L-молекула). У наближенні молекулярних орбіталей, за теоремою Купманса: (ТФП) 7.002 eV (D-молекула), 6.979 eV (L-молекула); (ХФ) 10.923 eV (D-молекула), 10.872 eV (L-

молекула). Експериментальне значення складає  $8.80 \pm 0.25$  eV [2]. Бачимо, що розрахунки у методі ТФП краще узгоджуються з експериментальними даними ніж у наближенні ХФ.

Відмітимо, що в роботі [3] було теоретично досліджено енергетичну структуру низки амінокислот, в тому числі L-молекул глутаміну. Методика обчислень була подібна нашій. Обчислене адиабатичне значення потенціалу іонізації, коли материнська молекула глутаміну та її іон знаходяться в рівноважних станах, рівне 8.52 eV (Gln). Бачимо, непогану узгодженість з нашою величиною і з експериментальними даними [2].

### Обчислення сумарних перерізів однократної іонізації молекули глутаміну

Для молекули глутаміну іонізація електронном з енергіями до 200 eV можлива з 29 орбіталей з відповідними енергіями зв'язку (до 200 eV), які містять по 2 електрони. Так, у наближенні ТФП для D-форм, енергія зв'язку найвищої орбіталі для молекули глутаміну становить -7.0022 eV, а найнижчої -30.5612 eV. Сумарний переріз однократної іонізації отримуємо підсумовуванням всіх перерізів однократної іонізації з кожної молекулярної орбіталі.

На рис. 1 наведено обчислені за ВЕВ моделлю і за формулою Гризінського (Gruz) сумарні перерізи однократної іонізації (від порогів до 60 eV) D-форм молекули глутаміну електронним ударом. При малих енергіях, близьких до порогових, повний експериментальний переріз іонізації визначається перерізом однократної іонізації саме материнських молекул. Нормування відносних величин експериментальних перерізів на теоретичні дані, проведене при енергії 8.5 eV у випадку молекули глутаміну, дасть можливість отримати абсолютні значення цих перерізів.

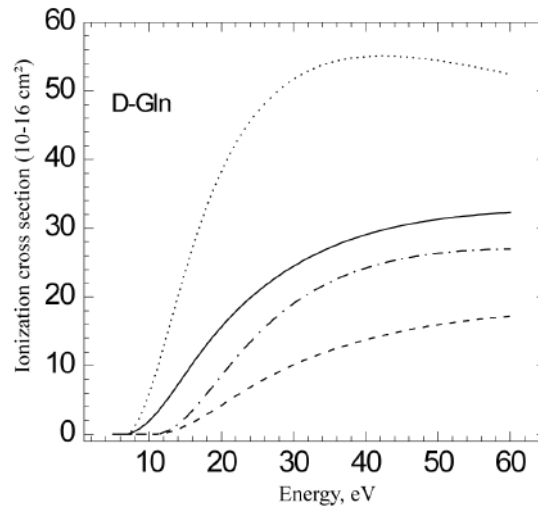


Рис. 1: Теоретичні розрахунки сумарних перерізів однократної іонізації D-форм молекул глутаміну: ВЕВ-ТФП (—); ВЕВ-ХФ (- -); Gryz-ТФП (...); Gryz-ХФ(- . - .).

Як бачимо з рис. 1, ВЕВ і Gryz перерізи, обчислені з використанням ТФП характеристик молекул, мають більш швидке зростання на початкових ділянках енергетичних залежностей перерізів іонізації, ніж аналогічні перерізи з ХФ характеристиками. Обчислені в однотипних наближеннях перерізи іонізації для обох молекул приблизно збігаються за величиною. Також перерізи ВЕВ-ТФП і Gryz-ТФП майже у 2 рази, при 60 eV, перевищують відповідні ВЕВ-ХФ і Gryz-ХФ перерізи. Відзначимо, що сумарні перерізи, обчислені за формулою Гризінського систематично перевищують відповідні ВЕВ перерізи.

У роботі [1] виміряні повні перерізи іонізації таких біомолекул як аденін ( $C_5H_5N_5$ ) і гуанін ( $C_5H_5N_5O$ ) електронним ударом при енергіях від порогів до 200 eV. Там також дано оцінку величини парціальних перерізів утворення різних іонів-фрагментів в процесі діелектронної іонізації молекул. Величина енергії і повного перерізу іонізації в максимумі складають: для аденіну - 90 eV,  $(2.8 \pm 0.6) \cdot 10^{-15} \text{ cm}^2$ , для гуаніну 88 eV,  $(3.2 \pm 0.7) \cdot 10^{-15} \text{ cm}^2$ . Виміряні енергетичні порогови іонізації рівні: для аденіну  $(8.8 \pm 0.2) \text{ eV}$ , для

гуаніну  $(8.3 \pm 0.2) \text{ eV}$ .

У роботі [4] використана ВЕВ модель для обчислення сумарних перерізів однократної іонізації електронним ударом біомолекул урацила ( $C_4H_4N_2O_2$ ), тиміну ( $C_5H_6N_2O_2$ ), цитозину ( $C_4H_5N_3O$ ), аденіну ( $C_5H_5N_5$ ), гуаніну ( $C_5H_5N_5O$ ) для енергій від порогів процесу до 5 keV. Там також розраховані максимальні значення сумарних перерізів однократної іонізації: гуанін -  $2.184 \cdot 10^{-15} \text{ cm}^2$  при енергії 80 eV; аденін -  $2.046 \cdot 10^{-15} \text{ cm}^2$  при 75 eV; тимін -  $1.761 \cdot 10^{-15} \text{ cm}^2$  при 82 eV; цитозин -  $1.658 \cdot 10^{-15} \text{ cm}^2$  при 80 eV; урацил -  $1.457 \cdot 10^{-15} \text{ cm}^2$  при 85 eV. Бачимо, що ці дані непогано узгоджуються з наведеними у [1] та з величинами за нашими розрахунками на рис. 1. Мабуть, такі величини максимумів перерізів іонізації та їх енергії притаманні біомолекулам.

Наведені вище формули дають можливість провести апроксимацію (fitting) виміряних перерізів (див. [8]). Для апроксимації використовують наступні формули ( $y \cdot 10^{-20} \text{ m}^2$ ):

У ВЕД моделі

$$\sigma_i^{BED}(x) = \frac{1}{x} \cdot \left\{ a \cdot \ln x + b \cdot \left(1 - \frac{1}{x}\right) + c \cdot \frac{\ln x}{x+1} \right\} \quad (9)$$

У ВЕВ моделі

$$\sigma_i^{BEV}(x) = \frac{1}{x} \cdot \left\{ a \cdot \left(1 - \frac{1}{x^2}\right) \cdot \ln x + b \cdot \left(1 - \frac{1}{x}\right) + c \cdot \frac{\ln x}{x+1} \right\} \quad (10)$$

у наближенні Гризінського

$$\sigma_i^{Gryz}(x) = \frac{1}{x} \cdot \left(\frac{x-1}{x+1}\right)^a \cdot \left\{1 + b \cdot \left(1 - \frac{1}{2x}\right) \cdot \ln [c + (x-1)^d]\right\} \quad (11)$$

Тут  $x=T/V_1$ , де  $V_1$  найменша енергія зв'язку електрона, а  $a, b, c, d$  — параметри підгонки (fitting) або параметри апроксимації. Зазначимо, що тут у BED-моделі перший доданок описує дипольну взаємодію, а третій виведено при інтегруванні інтерференційного члена формули Мотта [8].

Апроксимацію як правило проводять використовуючи метод найменших квадратів із залученням експериментально вимірянних значень порогів іонізації  $-V_1$ . Для трипараметричної апроксимації в BED- і BEB-моделях параметри можуть бути досить великими. Параметри отримані при використанні наближення Гризінського можуть бути менші за величиною і мати більш малі помилки, внаслідок використання саме 4-х параметрів. Отримані таким чином, параметри апроксимації можна впевнено використовувати у відповідних формулах для обчислення повних перерізів іонізації при проміжних і високих енергіях, а також для обчислення швидкостей іонізації даних молекул електронами.

## Висновки

Розглянуто застосування теоретичних наближень для розрахунку сумарних перерізів

однократної іонізації молекул електронним ударом — моделей Binary-Encounter-Dipole і Binary-Encounter-Bethe та формули Гризінського. Потенціал іонізації молекули глутаміну розрахований у теорії функціонала густини добре узгоджений з експериментальною величиною. Характеристики структури молекули глутаміну, отримані у теорії функціонала густини і використані в розрахунках перерізів дають кращий опис поведінки перерізів при малих, припорогових енергіях, до 30 eV, ніж у наближенні Хартрі-Фока.

Пропонується нормування відносних значень експериментальних повних перерізів іонізації молекул на розраховані припорогові сумарні перерізи їх однократної іонізації. Це дає змогу отримати абсолютні величини для цих експериментальних перерізів іонізації молекул та провести їх апроксимацію за формулами наведених моделей з використанням 3-х або 4-х параметрів (формула Гризінського).

Дане дослідження було виконано за часткової фінансової підтримки з боку Українського національного фонду досліджень (грант № 2020.01 / 0009 "Вплив іонізуючого випромінювання на структуру молекул амінокислот").

## СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

- [1] Шафраньош И.И., Свида Ю.Ю., Суховия М.И., Шафраньош М.И., Минаев Б.Ф., Барышников Г.В., Минаев В.А. Абсолютные эффективные сечения ионизации молекул аденина и гуанина электронным ударом // ЖТФ. — 2015. — Т. 85. — Вып. 10. — С. 16–22.
- [2] Завилопуло А.Н., Булгакова А.И. Масс-спектрометрия молекул глутаминовой кислоты и глутамина в газовой фазе // Письма в ЖТФ. — 2019. — Т. 45. — Вып. 24. — С. 36–40.
- [3] Baliulytė L. Quantum chemical investigations of the fragmentation of amino acids by low energy electrons // Summary of Doctoral Dissertation. Natural Sciences. Biophysics. — 2020. — N 011. Vilnius. — 50 p.
- [4] Mozejko P., Sanche L. Cross section calculations for electron scattering from DNA and RNA bases — Radiat Environ Biophys. - 2003. – V. 42. — P. 143-153.

- [5] Tamulienė J., Romanova L., Vukstich V., Papp A., Shkurin S., Baliulytė L., Snegursky A. On the influence of low-energy ionizing radiation on the aminoacid molecule: proline — *Eur. Phys. J. D.* — 2016. — V. 70. — P. 143–153
- [6] Tamulienė J., Romanova L., Vukstich V., Papp A., Baliulytė L., Snegursky A. The influence of low-energy ionizing radiation on the amino acid molecule: valine. // *Lith. Journ. Phys.* — 2018. — V. 58. — P. 135-148.
- [7] Tamulienė J., Romanova L., Vukstich V., Papp A., Baliulytė L., Snegursky A. The impact of low-energy ionizing radiation on glutamine. // *Int. Journ. Mass Spectr.* — 2019. — V. 444. — 116185.
- [8] Yong-Ki K., Rudd M.E. Binary-encounter-dipole model for electron-impact ionization // *Phys. Rev. A.* — 1994. — V. 50 (5). — P. 3954–3967.
- [9] Yong-Ki K., Irikura K.K., Ali M.A. Electron-Impact Total Ionization Cross Sections of Molecular Ions // *J. Res. Nat. Inst. Stand. Technol.* — 2000. — V. 105 (2). — P. 285–291.
- [10] Tanaka H., Brunger M.J., Campbell L., Kato H., Hoshino M., Rau A.R.P. Scaled plane-wave Born cross sections for atoms and molecules // *Rev. Mod. Phys.* — 2016. — V. 88 (025004). — P. 285–291.
- [11] Gryzinski M. Classical Theory of Atomic Collisions. I. Theory of Inelastic Collisions // *Phys. Rev.* — 1965. — V. 138 (2A). — P. A336–A358.
- [12] Смирнов О.В., Басалаев А.А., Бойцов В.М., Вязьмин С.Ю., Орбели А.Л., Дубина М.В. Фрагментация D- и L-энантиомеров аминокислот при взаимодействии с ионами  $3\text{He}^{2+}$  // *ЖТФ.* — 2014.— Т.84 (11). — С. 121–127.
- [13] . Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B., Scuseria G.E., Robb M.A., Cheeseman J.R., Scalmani G., Barone V., Mennucci B., Petersson G.A. Gaussian 09, Revision E.01. // Gaussian Inc., Wallingford CT. — 2009.
- [14] Демеш Ш.Ш., Завилопуло А.Н., Шпенник О.Б., Ремета Е.Ю. Энергии появления фрагментов при диссоциативной ионизации молекулы гексафторида серы электронным ударом / Ш.Ш. Демеш, А.Н. Завилопуло, О.Б. Шпенник, Е.Ю. Ремета // *ЖТФ.* — 2015. — Т. 85 (6). — С. 44–52.
- [15] Demesh Sh.Sh., Remeta E.Yu. Ion appearance energies at electron-impact dissociative ionization of sulfur hexafluoride molecule and its fragments // *Eur. Phys. J. D.* — 2015. — V.69. — P. 168–176. DOI:10.1140/epjd/e2015-50636-4
- [16] National Center for Biotechnology Information. PubChem Database. Glutamine, CID=5961, <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/Glutamine>.
- [17] National Center for Biotechnology Information. PubChem Database. Glutamic acid, CID=33032, <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/Glutamic-acid>.
- [18] Hanwell M.D., Curtis D.E., Lonie D.C., Vandermeersch T., Zurek E., Hutchison G.R. Avogadro: an advanced semantic chemical editor, visualization, and analysis platform // *Journal of Cheminformatics.* — 2012. — V. 4. — P. 17–22. DOI: 10.1186/1758-2946-4-17

Стаття надійшла до редакції 24.05.2020

Ш.Ш. Демеш<sup>1</sup>, О.В. Васильев<sup>2</sup>, Е.Ю. Ремета<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт ядерных исследований (АТОМКИ), 4026, Дебрецен, Венгрия

<sup>2</sup>Институт электронной физики НАН Украины, 88017, Университетская 21, Ужгород, Украина, e-mail: demessanyi@gmail.com; remetoveyu@gmail.com; vasyliov.oleksandr.1996@gmail.com

## ОПИСАНИЕ ПРОЦЕССА ОДНОКРАТНОЙ ИОНИЗАЦИИ СЛОЖНЫХ МОЛЕКУЛ

Изложена методика исследования сечений процесса однократной ионизации сложных молекул электронным ударом. Приведены аналитические выражения для полных пересечений этого процесса, которые используются в известных приближениях – ВЕД, ВЕВ, формула Гризинского. Описана аналитическая аппроксимация этих сечений по соответствующим формулам. Рассчитаны потенциал ионизации и сечения ионизации молекул глутамина электронным ударом.

**Ключевые слова:** сечение, ионизация, приближение, аппроксимация, молекула, глутамин.

Sh. Demes<sup>1</sup>, O. Vasyliov<sup>2</sup>, E. Remeta<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Institute for Nuclear Research (АТОМКИ), 4026, Debrecen, Hungary

<sup>2</sup>Institute of electron physics National academy of sciences of Ukraine, 88017, 21, University Str., Uzhhorod, Ukraine, e-mail: demessanyi@gmail.com; remetoveyu@gmail.com; vasyliov.oleksandr.1996@gmail.com

## DESCRIPTION OF SINGLE IONIZATION OF COMPLEX MOLECULES

**Purpose.** The article is devoted to brief exposition of methodology of calculation and research of cross-sections of the single ionising of complex molecules, e.g. amino acids, by an electron impact. The normalization of relative values of experimental complete cross-sections of ionization with the aim of obtaining its absolute values is proposed. Approximation procedure of these absolute cross-sections is briefly discussed.

**Methods.** The well-known analytical expressions of description of ionization process of molecules are given in semi-classical (Binary - Encounter - Dipole and Binary - Encounter - Bethe) and classical (Gryzinski formula) approaches. On their basis, analytical expressions for realization of procedure of approximation of ionization cross-section of molecules are given.

**Results.** Ionization potential of glutamine molecule in two approximations - adiabatic and molecular orbitals – were calculated. Thus, for the calculation of structure of molecule two approaches — density-functional theory and Hartree-Fock theory – were used. Calculated values were compared with experimental data. Using mentioned formulas, energy dependences of single ionization cross-sections of glutamine molecule by electron impact up to 60 eV energy were calculated. Two approaches – density-functional theory and Hartree-Fock – were used as well.

**Conclusions.** Considered analytical expressions for the calculation of single ionization of cross-sections may be successfully used for the analysis of the ionization process of complex molecules by an electron impact. Energy behavior of calculated ionization cross-sections differs significantly between used approaches. Ionization potential of glutamine molecule that was calculated using density-functional theory coincides better with experimental data.

**Keywords:** cross section, ionization, approach, approximation, molecule, glutamine.

## REFERENCES

- [1] Shafranyosh I.I., Svyda Yu.Yu., Sukhoviya M.I., Shafranyosh M.I., Minaev B.F., Baryshnikov G.V., Minaev V.A. Absolute values of adenine and guanine molecules ionization electron-impact cross sections. — *ZhTP*. — 2015. — V. 85 (10) — P. 16–22.
- [2] Zaviropulo A.N., Bulgakova A.I. Gas phase glutamin acid and glutamin molecules mass-spectrometry — *Pi'sma ZhTP*. — 2019. — V. 45 — P. 36–40p.
- [3] Baliulytė L. Quantum chemical investigations of the fragmentation of amino acids by low energy electrons // Summary of Doctoral Dissertation. Natural Sciences. Biophysics. — 2020. — N 011. Vilnius. — 50 p.
- [4] Mozejko P., Sanche L. Cross section calculations for electron scattering from DNA and RNA bases — *Radiat Environ Biophys*. - 2003. — V. 42. — P. 143-153.
- [5] Tamulienė J., Romanova L., Vukstich V., Papp A., Shkurin S., Baliulytė L., Snegursky A. On the influence of low-energy ionizing radiation on the aminoacid molecule: proline — *Eur. Phys. J. D*. — 2016. — V. 70. — P. 143–153
- [6] Tamulienė J., Romanova L., Vukstich V., Papp A., Baliulytė L., Snegursky A. The influence of low-energy ionizing radiation on the amino acid molecule: valine. // *Lith. Journ. Phys.* — 2018. — V. 58. — P. 135-148.
- [7] Tamulienė J., Romanova L., Vukstich V., Papp A., Baliulytė L., Snegursky A. The impact of low-energy ionizing radiation on glutamine. // *Int. Journ. Mass Spectr.* — 2019. — V. 444. — 116185.
- [8] Yong-Ki K., Rudd M.E. Binary-encounter-dipole model for electron-impact ionization // *Phys. Rev. A*. — 1994. — V. 50 (5). — P. 3954–3967.
- [9] Yong-Ki K., Irikura K.K., Ali M.A. Electron-Impact Total Ionization Cross Sections of Molecular Ions // *J. Res. Nat. Inst. Stand. Technol.* — 2000. — V. 105 (2). — P. 285–291.
- [10] Tanaka H., Brunger M.J., Campbell L., Kato H., Hoshino M., Rau A.R.P. Scaled plane-wave Born cross sections for atoms and molecules // *Rev. Mod. Phys.* — 2016. — V. 88 (025004). — P. 285-291.
- [11] Gryzinski M. Classical Theory of Atomic Collisions. I. Theory of Inelastic Collisions // *Phys. Rev.* — 1965. — V. 138 (2A). — P. A336-A358.
- [12] Smirnov O.V., Basalaev A.A., Boitsov V.M., Vyazmin S.Yu., Orbeli A.L., Dubina M.V. D- and L-enantiomer of amino acids fragmentation at its interaction with  $3\text{He}^{2+}$  ions // *ZhTP*. — 2014. — V.84 (11). — P. 121–127.
- [13] . Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B., Scuseria G.E., Robb M.A., Cheeseman J.R., Scalmani G., Barone V., Mennucci B., Petersson G.A. Gaussian 09, Revision E.01. // Gaussian Inc., Wallingford CT. — 2009.
- [14] Demes S.S., Zaviropulo A.N., Shpenik O.B., Remeta E.Yu. Energy appearance of fragments at electron-impact dissociative ionization of sulfur hexafluoride molecule // *ZhTP*. — 2015. — V. 85 (6). — P. 44–52.
- [15] Demesh Sh.Sh., Remeta E.Yu. Ion appearance energies at electron-impact dissociative ionization of sulfur hexafluoride molecule and its fragments // *Eur. Phys. J. D*. — 2015. — V.69. — P. 168–176. DOI:10.1140/epjd/e2015-50636-4



- [16] National Center for Biotechnology Information. PubChem Database. Glutamine, CID=5961, <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/Glutamine>.
- [17] National Center for Biotechnology Information. PubChem Database. Glutamic acid, CID=33032, <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/Glutamic-acid>.
- [18] Hanwell M.D., Curtis D.E., Lonie D.C., Vandermeersch T., Zurek E., Hutchison G.R. Avogadro: an advanced semantic chemical editor, visualization, and analysis platform // *Journal of Cheminformatics*. — 2012. — V. 4. — P. 17–22. DOI: 10.1186/1758-2946-4-17

©Ужгородський національний університет