

0.1. Ахметьянова А.И. Математическое моделирование гомодесмических реакций органических соединений

Работа направлена на разработку новых комплексных подходов к математическому моделированию с применением современных компьютерных технологий [1]. Разрабатываемая система предназначена для анализа механизмов химических превращений, поскольку термодинамические параметры химических соединений представляют собой фундаментальную характеристику энергосодержания вещества. Недостаток экспериментальных данных привел к разработке различных вариантов приближенного расчета термодинамических величин, в том числе с использованием современных квантово-химических подходов. Определение базиса гомодесмических реакций (ГДР) позволяет осуществлять независимые оценки, контролировать воспроизводимость результатов и, тем самым, повышать надежность теоретического определения стандартной энтальпии образования химического соединения [2]. Тем самым возникает решаемая задача построения базиса ГДР, разработки соответствующего математического и программного обеспечения его определения.

Результатом выполнения данной работы является новая разработанная система для оценки молекулярной энергетики химических соединений: совокупность математических методов, моделей и алгоритмов; комплекс различных по функциям и взаимосвязанных программ, а также программные документы, необходимые для эксплуатации этих программ [3]. Получены надежные количественные данные по величинам энергосодержания циклических органических соединений, рассчитаны энергии напряжения циклов различного строения. Продемонстрирован универсализм оригинальной теоретической методики исследования молекулярной энергетики, не имеющей аналогов в мировой науке. Сформированный массив количественных данных важен для понимания закономерностей разнообразных химических реакций, идущих с образованием или разрывом циклов. Помимо фундаментального значения, эти знания могут быть применены при анализе технологических схем промышленно важных химических процессов современной нефтехимии.

В основе разработки программы лежит теоретико-графовый метод. Разработанная программа генерирует набор независимых гомодесмических реакций для исследуемого соединения, что повышает надежность теоретического определения стандартной энтальпии образования [3]. Для хранения информации о химических соединениях спроектирована реляционная база данных с информацией о структуре, составе химического соединения и его энергетических характеристиках [4].

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 18-07-00584 А).

Научный руководитель — д.ф.-м.н. Исмагилова А. С.

Список литературы

- [1] Зиганшина Ф. Т., Исмагилова А. С., Ахметьянова А. И. и др. Компьютерное моделирование задачи определения базиса гомодесмических реакций // Системы управления и информационные технологии. 2019. № 4 (78). С. 10–15.
- [2] KHURSAN S., ISMAGILOVA A., SPIVAK S. A graph theory method for determining the basis of homodesmic reactions for acyclic chemical compounds // Doklady Physical Chemistry. 2017. Vol. 474. P. 99–102.
- [3] АХМЕРОВ А. А., ЗИГАНШИНА Ф. Т., АХМЕТЬЯНОВА А. И., ИСМАГИЛОВА А. С., ЮНУСОВ А. А. Теоретический расчет энергетических характеристик органических соединений (свидетельство № 2020660354) / М.: Федеральная служба по интеллектуальной собственности (Роспатент), 2020.
- [4] АХМЕТЬЯНОВА А. И., ЗИГАНШИНА Ф. Т., ИСМАГИЛОВА А. С., АХМЕРОВ А. А. Энергетические характеристики органических соединений для расчета стандартной энтальпии образования и энергии напряжения циклов (свидетельство № 2020621607) / М.: Федеральная служба по интеллектуальной собственности (Роспатент), 2020.