

Применение численных методов для определения базиса гомодесмических реакций химических соединений

Научный руководитель – Исмагилова Альбина Сабирьяновна

Ахметьянова Альбина Ильшатовна

Студент (магистр)

Башкирский государственный университет, Факультет математики и информационных технологий, Уфа, Россия

E-mail: ai-albina@mail.ru

Публикация подготовлена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 18-07-00584 А).

Основной нашей задачей является разработка алгоритмов конструирования базиса гомодесмических реакций для различных типов химических соединений. Для реализации алгоритмов все соединения представляются в виде графов. Из данных графа составляется матрица смежности для того, чтобы правильно задать его на языке программирования. Ранее уже было разработано программное обеспечение для ациклических соединений[1], но ациклические соединения представлялись в виде линейных графов и для них составлялась матрица связей групп. При выборе пользователем соединения, программа считывает с базы данных информацию о групповом составе и матрицу смежности[2].

Разработано математическое и программное обеспечение, на языке программирования Delphi, для оценки энергетических характеристик химических соединений[3]. Применен метод сравнительного расчета, основанный на использовании гомодесмических реакций (ГДР). В общем случае для произвольного химического соединения существует неоднозначность в выборе ГДР. Эта проблема решена с помощью процедуры декомпозиции молекулярного графа исследуемого соединения и соответствующей матрицы связи термодинамических групп. Результатом декомпозиции является базис независимых ГДР. Определение базиса ГДР позволяет осуществлять независимые оценки энергии молекул, контролировать воспроизводимость результатов и повышать надежность теоретического определения энергетических характеристик.

Результатом выполнения данной работы являются: анализ исследуемого тестового набора циклических органических соединений, формирование базиса ГДР для каждого циклического соединения; определение энергосодержания соединений тестового набора, расчет энергий напряжения циклов соединений циклопропанового ряда, выявление недостоверных экспериментальных данных; проектирование реляционной базы данных для хранения информации о структуре и составе циклических соединений.

Источники и литература

- 1) Khursan S.L., Ismagilova A.S., Spivak S.I. A graph theory method for determining the basis of homodesmic reactions for acyclic chemical compounds // Doklady Physical Chemistry, 2017. Т. 474. № 2. P. 99-102.
- 2) Khursan S.L., Ismagilova A.S., Akhmetyanova A.I. Determining the basis of homodesmotic reactions of cyclic chemical compounds // Doklady Physical Chemistry, 2018. Т. 92. № 7. P. 1312-1320.
- 3) Зиганшина Ф.Т., Ахметьянова А.И., Исмагилова А.С., Хурсан С.Л., Ахмеров А.А. Теоретико-графовый метод определения гомодесмических реакций для циклических химических соединений // Системы управления и информационные технологии, 2018. Т. 74. № 4. С. 72-77.