

Математическое моделирование 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

Определение энергосодержания химических соединений необходимо в различных отраслях производства и науки. Формирование взаимосвязи между строением вещества и его свойствами, является фундаментальной задачей современной физической органической химии. Результаты могут применяться при определении количественных характеристик органических соединений. Такая информация зачастую используется на практике в научных исследованиях. Результаты могут быть применены при использовании в тепловых расчетах при разработке технологий производства практически значимых продуктов, например при разработке высокоэнергетических топлив.

Алгоритм расчета энергии напряжения циклов в органических соединениях различных классов основан на конструировании гомодесмических реакций[1]. Гомодесмическая реакция - формальное термохимическое уравнение, при построении которого учитываются такие показатели, как связевой баланс, материальный баланс, групповой баланс, изогирический баланс и баланс по невалентным эффектам[2]. Нахождение базисного набора реакций разделения групп, основан на теоретико-графовом представлении анализируемых структур. Это позволяет выполнять преобразования над матрицей смежности вершин молекулярного графа, которая однозначно описывает химическое соединение, и, тем самым, переписать алгоритм на машинный язык.

Разработан алгоритм расчета энергии напряжения циклов в органических соединениях различных классов[3]. Проведен анализ зависимости влияния структурных особенностей на энергетику соединений, невалентных взаимодействий, расчет энергии напряжения циклов соединений, свободной от других невалентных взаимодействий (гош-, внутримолекулярная водородная связь, эффекты малых молекул) в референсных соединениях.

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

Источники и литература

- 1) Akhmetshina E.S., Khursan S.L. Complete set of homodesmotic reactions for the analysis of non-valence effects in the three-to-six-membered cyclic organic compounds // *Thermochimica Acta*. Volume 685, March 2020
- 2) 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.
- 3) Зиганшина Ф.Т., Исмагилова А.С., Ахметьянова А.И., Ахметшина Е.С., Ахмеров А.А. Компьютерное моделирование задачи определения базиса гомодесмических реакций // *Системы управления и информационные технологии*. 2019. № 4 (78). С. 10-15.