

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ БАЗИСА ГОМОДЕСМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ ХИМИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

Ахметьянова А.И., Исмагилова А.С., ¹Зиганшина Ф.Т., Ахмеров А.А.

Башкирский государственный университет, Россия, 450076, г. Уфа, ул. Заки Валиди, д. 32, 89649575980, ai-albina@mail.ru, 89273033355, ismagilovaas@rambler.ru, 89659465256, aaazat@list.ru

¹Уфимский государственный нефтяной технический университет, Россия, 450062, г. Уфа, ул. Космонавтов, д. 1, 89173709852, fairusa85@mail.ru

Результатом исследования является математическое и программное обеспечение задачи определения базиса гомодесмических реакций (ГДР) для циклических химических соединений. Определение базиса ГДР позволяет осуществлять независимые оценки, проверять воспроизводимость расчетной величины, отсеивать недостоверные данные и, в конечном счете, повышать надежность теоретического определения энергетических характеристик.

Ранее авторами было разработано математическое и программное обеспечение для ациклических соединений [1]. В работе [2] описано математическое обеспечение для оценки энергетических характеристик циклических химических соединений.

Химическое соединения наглядно можно представить в виде молекулярного графа. Граф, в свою очередь, однозначно описывается матрицей смежности вершин. Программа анализирует групповой состав, матрицу смежности вершин графа в момент выбора пользователем соединения из базы данных, и рассчитывает все возможные комбинации термохимических групп[2]. Учет балансных соотношений позволяет выписать базис ГДР.

В настоящий момент авторами расширена база данных, разработан алгоритм расчета энергии напряжения циклов в органических соединениях различных классов, выявлены и проанализированы зависимости влияния структурных особенностей на энергетику соединений, а также малообоснованные экспериментальные данные.

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

Литература

1. *Khursan S.L., et al.*. A graph theory method for determining the basis of homodesmic reactions for acyclic chemical compounds // *Doklady Physical Chemistry*, 2017. Т. 474. № 2. Р. 99-102.
2. *Зиганшина Ф.Т., и др.* Теоретико-графовый метод определения гомодесмических реакций для циклических химических соединений // *Системы управления и информационные технологии*, 2018. Т. 74. № 4. С. 72-77.