

НТИ-96

МОСКВА, 20-21 НОЯБРЯ 1996 г.

**МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
ПОД ЭГИДОЙ МЕЖДУНАРОДНОЙ ФЕДЕРАЦИИ ПО ИНФОРМАЦИИ
И ДОКУМЕНТАЦИИ (МФД)**

**ИНФОРМАЦИОННЫЕ
ПРОДУКТЫ,
ПРОЦЕССЫ И
ТЕХНОЛОГИИ**

**INFORMATION
PRODUCTS,
PROCESSES
AND TECHNOLOGIES**

**МАТЕРИАЛЫ КОНФЕРЕНЦИИ
PROCEEDINGS OF THE CONFERENCE**

ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНАЯ СИСТЕМА ПРЕДСКАЗАНИЯ КОМПЛЕКСООБРАЗУЮЩЕЙ СПОСОБНОСТИ НОВЫХ ЛИГАНДОВ

***В.П.Соловьев, Н.Н.Страхова,
В.П.Казаченко, **Н.Н.Кочанова,
Е.В.Колтунова**

**Институт физиологически активных веществ
Российской академии наук*

****ВИНИТИ**

Объектом исследования является растворное термодинамическое равновесие в системе катион металла - лиганд - растворитель - анион (M-L-S-A). Основными изучаемыми катионами являются катионы щелочных и щелочно земельных металлов, лигандами - поданды и макроциклы, в частности, краун-эфиры, растворителями - вода, метанол и ацетонитрил,

анионами - хлорид-, пикрат- и перхлорат ион. В изучаемой системе возможны 11 основных взаимодействий: главное - M-L - комплексообразование катиона металла с лигандом, M-A - ассоциация катиона металла с противоионом, M-L-A - смешанно-лигандный комплекс, L-A - комплексообразование лиганда с анионом и процессы сольватации M-S, L-S, A-S, M-L-S, M-A-S, L-A-S и M-L-A-S.

Решаемой проблемой является оценка и предсказание равновесной константы устойчивости $b = [M_m L_n] / [M]^m [L]^n$ и изменения энтальпии ΔH для реакции комплексообразования $mM + nL = M_m L_n$.

Решение поставленной задачи.

(i) Создана база данных TMLCO (The Thermodynamics of the Metal-Ligand Complexation), программная оболочка которой подготовлена для Windows 3.1/95. База данных продолжает пополняться фактографической информацией по термодинамике комплексообразования катионов металлов с органическими лигандами в растворах. База TMLCO содержит разработанную экспертами структуру информационных полей. Эти поля включают информацию о типе катиона металла, противоиона, о лиганде (названия, эмпирическая формула, 2D- и 3D-структура, структурные фрагменты, регистрационный номер), среде взаимодействия (растворитель, концентрации реагентов, ионная сила, другие добавленные вещества), реакции (основной процесс, учтенные дополнительные процессы, температура), цифровых величинах (тип равновесия, величины констант устойчивости, энтальпий и энтропий комплексообразования), методе (название экспериментального метода, калибровка, комментарии) и источнике информации (библиография, авторы, название работы, журнал). База данных содержит около 10000 записей.

(ii) Для экспериментальной оценки констант устойчивости и дополнительных термодинамических величин комплексообразования развиваются: а) модельные уравнения, связывающие экспериментально измеряемое свойство с равновесными концентрациями химических форм в растворе, б) алгоритмы расчетов констант устойчивости и сопутствующих величин из экспериментального изучения химических равновесий в растворах, в) программная техника. На этой платформе развивается многоцелевая компьютерная программа CHEM-EQUIL для расчета химических равновесий из экспериментальных данных. Это универсальное программное обеспечение базируется на общем методе нелинейных наименьших квадратов для оценки стехиометрии, констант устойчивости и физико-химических величин (электродной функции для потенциометрии, энтальпии и энтропии для калориметрии, коэффициентов экстинкции для ИК, видимой и УФ спектроскопии, химических сдвигов для ЯМР спектроскопии, мольной электропроводности для кондуктометрии и др.), исходя из любой комбинации указанных экспериментальных методов, как для катион-лигандных комплексов, так для водородно-связанных комплексов. Подход основан как на использовании методов с рас-

четом производных (типа метода Ньютона-Рафсона), так и без них (симплекс-метод, метод Монте-Карло). Использование различных алгоритмов оптимизации, преобразование и шкалирование переменных позволяют надежно оценивать константы устойчивости из экспериментальных данных. Программа CHEM-EQUI-LI работает под управлением MS DOS и Windows 3.11/95.

(iii) Моделирование структура - комплексобразующая способность базируется на следующих подходах: анализе сходства лигандов, использовании топологических индексов лигандов, 2D- и 3D- их молекулярных фраг-

ментов, привлечении методов молекулярной механики и динамики, использовании метода нейронных сетей. Было найдено, что влияние растворителя на комплексообразование краун-эфиров с катионами металлов в растворах может быть учтено на основе линейных корреляций между константой устойчивости и свободной энергией переноса катиона металла из одно растворителя в другой. Комплексообразование порандов со щелочными металлами в растворах удовлетворительно описывается вкладом их фрагментов - кратчайших расстояний между всеми парами неводородных атомов.