

11-14.01.92

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
ИНСТИТУТ ФИЗИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ

IX ВСЕСОЮЗНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
ХИМИЧЕСКАЯ ИНФОРМАТИКА

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ И ПРОГРАММА КОНФЕРЕНЦИИ

Часть I

11—15 января 1992 г.
Черноголовка

ПОИСК ВЫСОКОСЕЛЕКТИВНЫХ КОМПЛЕКСОНОВ И МОДЕЛИРОВАНИЕ РАВНОВЕСИЙ В РАСТВОРАХ.

Соловьев В.П., Раевский О.А., Зефиров Н.С.

Институт физиологически активных веществ АН СССР
142432, Черноголовка

Поиск высокоселективных полидентатных комплексонов на основе моделирования структура лиганда – комплексообразующая способность и экспериментального исследования термодинамики комплексообразования связан с моделированием химических равновесий в растворах. Для этого создан комплекс программ CHEM_EQU (Chemical Equilibrium) для решения задач химического равновесия на персональных компьютерах типа IBM PC. Для гомогенных равновесий в растворах пакет программ позволяет рассчитать значения всех равновесных концентраций компонентов при заданных равновесных константах для всех равновесий в растворе. Максимальное число обрабатываемых равновесий – 50. Главным же образом программы предназначены для построения моделей равновесий в растворах и расчета равновесных констант и различных физико-химических параметров по экспериментальным данным одного или нескольких физико-химических методов. Например, по данным КАЛОРИМЕТРИИ определяются равновесные константы и энтальпии реакций, ИК-СПЕКТРОФОТОМЕТРИИ – константы равновесий и молярные экстинкции, ЯМР-СПЕКТРОСКОПИИ – константы и химические сдвиги комплексов, pH-МЕТРИИ – константы равновесий.

Программы CHEM_EQU применимы также при решении задач в области тензиметрии, делькометрии, в планировании синтеза и расчете выходов реакций, в расчете критериев молекулярного распознавания. Найдены характеристики для оценивания селективности лигандов, например, по отношению к катионам металлов в случаях образования разного числа комплексов любой стехиометрии.

В моделировании химических равновесий используется нелинейный метод наименьших квадратов с привлечением таких алгоритмов минимизации функционалов как метод Ньютона, симплекс-метод и метод Монте-Карло. Математические подходы к расчету равновесий детально изложены ранее [1]. Используемые языки – ФОРТРАН-77 и ТУРБО-ПАСКАЛЬ.

1. Соловьев В.П., Внук Е.А., Страхова Н.Н., Раевский О.А. // Итоги науки и техники. Химическая термодинамика и равновесия. – М: ВИНТИ, 1991. Т.7. – 373 С.