

Березовський Гліб Геннадійович

1 курс, група ЛЦ-41,
інженерно-хімічний факультет,
НТУУ «КПІ»

Науковий керівник:
Бахтіна Г. П., к. ф.-м.н.,
доцент ФМФ НТУУ «КПІ»

Математичні моделі в органічній хімії

Органічна хімія виникла в результаті дослідження живої матерії, складу органічних молекул. Базовою концепцією органічної хімії є структурна теорія, яка доповнюється стереохімією. Згідно цій фундаментальній теорії почалося установлення структури природних речовин та здійснення синтезу органічних сполук, зокрема, асиметричного синтезу у випадку хиральних молекул. З точки зору структурної теорії у хіміків-органіків виникають дві фундаментальні проблеми.

Першою проблемою є здійснення структурних трансформацій, тобто, переходу від однієї структури до іншої або отримання незвичайних та невідомих структур. Зауважимо, що задача ускладнюється тим, що на відміну від багатьох інших наук в хімії немає механічних аналогій, а мовою хіміків є мова структурних формул.

Другою проблемою є співвідношення структури і властивості речовини; синтез не речовин, а властивостей (наприклад, основною задачею медичної хімії є створення сполук із заданою фізіологічною активністю, так званий, раціональний драг-дизайн (від англ. drug – ліки)).

В наш час в органічній хімії відбувається значний перерозподіл зусиль в бік другої фундаментальної задачі. Проблема моделювання зв'язку між структурою та властивостями органічних сполук є однією з важливих математичних задач сучасної теоретичної хімії. Знайдені закономірності дозволяють виключити стадію експерименту, спрогнозувати властивості нових хімічних сполук безпосередньо за їх структурою та здійснити цілеспрямований пошук сполук, що мають задані властивості. Наукові дослідження в галузі математичного моделювання зв'язку

«структура-властивість» виникають на перетині органічної хімії, дискретної математики, регресійного аналізу, програмування, розглядаються як частина математичної хімії або хімічної інформатики та інтенсивно розвиваються завдяки широким втиленням ЕОМ, створенню баз даних щодо структур та властивостей сполук, доступністю обчислювальної техніки для хіміків, що надає можливість аналізу статистичної інформації з метою виявлення певних закономірностей.

Виникають нові напрями: структурне моделювання (тобто одночасно із звичайними структурними пошуками формується загальна тенденція спрямованої структурної модифікації активних речовин та створення специфічних реагентів для такої модифікації); QSAR (Quantitative Structure-Activity Relationship – кількісне співвідношення структура-властивість») як деяке комп'ютерне правило, що описує будь-яку молекулярну або біологічну властивість через дескриптори (числа або їх сукупність, які характеризують структуру органічної сполуки через суттєві її риси). Основою для розробки таких підходів є загальна математична природа структурних формул органічних сполук (вони є міченими графами та властивості сполук є інваріантами відповідних графов).
Dninaukifsp2015

В доповіді наводяться приклади робіт з «молекулярного дизайну» - напряму в хімії, який вивчає оптимальні шляхи синтезу молекул заданої геометричної форми (моделі молекул білого фосфору, вуглеводню, кубану, гексохлориду сірки, узагальнена модель тетра-трет-бутилтетраєдру); коментується явище «самозбірання» (одне з проявів самоорганізації в хімії) з ілюстрацією процесу самозбірання з нитей ДНК, процесу створення одного з простіших катенанів, схемою синтезу вуглеводню Мебіуса та малюнками молекулярного «топологічного перемикача»; на прикладі алканів надається реалізація ідеї опису структури молекул числами (топологічними індексами), які пов'язані із структурою молекулярних графів; аналізуються можливості програмних пакетів PC GAMESS та Gromacs для створення молекулярно-механічної моделі олигопептида.