

## **Представление молекул для автоматического исследования пространства химических превращений**

Мурзина А. А., Университет ИТМО, г. Санкт-Петербург  
Научный руководитель – Сергушичев А. А., к.т.н., доцент ФИТиП Университета ИТМО

### **Введение**

Для описания подавляющего большинства органических молекул недостаточно знания не только качественного и количественного состава, но и всех связей. У молекул, обладающих трёхмерной структурой, с различными взаимными расположениями атомов (пространственные изомеры или стереоизомеры) при сохранении всех связей различные внутренние энергии и, соответственно, различные механизмы участия в реакциях. Как правило, совершив поворот вокруг одинарной сигма-связи до отличного от данного локального минимума энергии по всем направлениям (в таком случае данная точка находится на поверхности выпуклой вниз при условии непрерывно дифференцируемой поверхности), получим другой изомер.

Определение молекулы заданием координат всех атомов однозначно, но при этом избыточно. Передвижение всех атомов молекулы на фиксированный вектор не изменит молекулу, хотя совершенно другая запись будет соответствовать новому положению атомов.

Для простых молекул несложно определить все возможные конформеры путем конформационного анализа. Для более сложных молекул лучше производить конформационный поиск, чтобы найти все низкоэнергетические пространственные изомеры. Расположение стационарных точек, особенно энергетических минимумов на потенциальной энергетической гиперповерхности устойчивых молекул, продолжает играть центральную роль в вычислительной химии.

### **Цель работы**

Целью работы является исследование и разработка дискретного метода для поиска путей и циклов в пространстве химических конфигураций и их превращений в процессе каталитического синтеза.

### **Базовые положения исследования**

Известно множество методов конформационного поиска для генерации низкоэнергетических конформеров. Эти методы включают в себя процедуры, использующие систематическое или стохастическое (так называемые Монте-Карло алгоритмы) вариацию углов кручения, методы, основанные на Metropolis Monte Carlo (включая моделируемый отжиг), стохастическая вариация декартовых координат, стохастическая вариация межъядерных расстояний (геометрия расстояния), методы, основанные на молекулярной динамике. Однако эти методы требуют большого числа расчётов функции энергии текущего состояния молекул.

Существующие методы дискретизации отдельных молекул и их групп, ассоциированных с помощью координационных связей являются основным методом алгоритмов поиска путей реакций.