

Разработанная система распределенного решения задач с использованием неотчуждаемых ресурсов, содержащая все необходимые модули, для выполнения вычислений и управления ними, позволяет эффективно решать подобные задачи с минимальными затратами для пользователя, применяя простаивающие мощности компьютеров.

- 1) Ott T., Kern A., Schuffenhauer A., Popov M., Acklin P., Jacoby E., and Stoop R. Sequential Superparamagnetic Clustering for Unbiased Classification of High-Dimensional Chemical Data. J. Chem. Inf. Comput. Sci. 2004, 44, 1358-1364.
- 2) Willett P. Similarity and Clustering in Chemical Information Systems // Letchworth, Research Studies Press. - 1987.
- 3) Butina D. Unsupervised Data Base Clustering Based on Daylight's Fingerprint and Tanimoto Similarity: A Fast and Automated Way To Cluster Small and Large Data Sets. J. Chem. Inf. Comput. Sci. 1999, 39, 747-750.
- 4) Павловский В. И., Ткач Ю. Э. Распределенная система параллельных вычислений для решения задач большой размерности // Труды второй международной конференция "Распределенные вычисления и Grid-технологии в науке и образовании". - Дубна: ОИЯИ. – 2006. - Д11-2006-167. - С. 379-386.

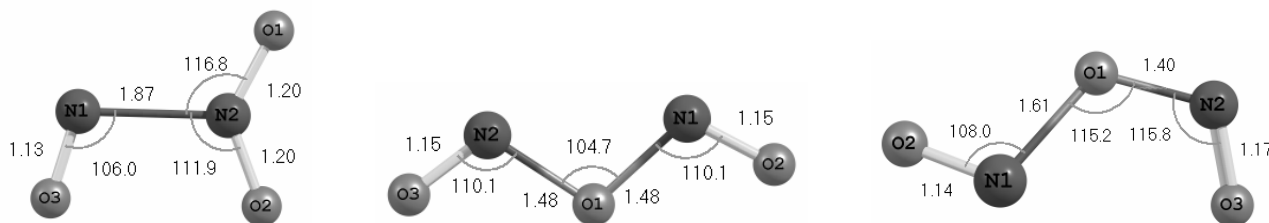
ДФТ-РАСЧЕТЫ ИЗОМЕРОВ АЗОТИСТОГО АНГИДРИДА N_2O_3 . КВАНТОВОХИМИЧЕСКОЕ СВИДЕТЕЛЬСТВО НОВОГО ИЗОМЕРА

Захаров И.И.

Восточноукраинский национальный университет имени Владимира Даля,
Технологический институт, г. Северодонецк, E-mail: zvonu@rambler.ru

Азотистый ангидрид N_2O_3 — в обычных условиях неустойчивое $N_2O_3 \leftrightarrow NO + NO_2$ соединение и практического применения пока не находит. Тем не менее, оно является промежуточным продуктом в многочисленных превращениях окислов азота. С учетом этого, любые схемы и механизмы реакций окисления соединений азота требуют знаний об особенностях электронного и молекулярного строения N_2O_3 . Например, вопреки хорошо известной стадии $2NO + O_2 \rightarrow 2NO_2$ (1) в производстве азотной кислоты, физиологическое окисление NO кислородом в воде образует *нитриты* (производные азотистой кислоты), а не *нитраты* (производные азотной кислоты) [1]. Это значит, что после реакции (1) образуется азотистый ангидрид. Причем, согласно американским исследователям [2], это должен быть до сих пор неизвестный, реакционно-способный интермедиат N_2O_3 .

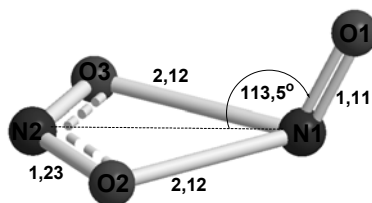
В данной работе проведены квантово-химические расчеты методом функционала плотности (DFT/B3LYP) в расширенном базисе 6-311++G(3df) для известных молекулярных изомеров N_2O_3 (длины связей приведены в ангстремах, углы – в градусах):



Квантово-химические расчеты оптимизированной молекулярной геометрии с последующим анализом колебательных частот позволяет охарактеризовать возможную стабильность рассчитанной молекулярной структуры [3].

Проведенный расчет колебательных частот для оптимизированной структуры нового изомера NONO₂, так же как и для трех известных ранее изомеров, показывает отсутствие мнимых частот в ИК-спектре. Это означает, что молекулярная структура NONO₂

характеризується локальним мінімумом на гіперповерхності потенціальної енергії і відповідає устійчивому стану ізомера молекули N_2O_3 .



Для молекулярної структури $NONO_2$ (нитрит нитрозонія) характерні найбільший дипольний момент (2,9 Д) і найбільше значення ентропії $S^{\circ}_{298}=305,3$ Дж/(моль·К) із всіх ізомерів N_2O_3 . По нашому мнению, именно это должно способствовать его преимущественному формированию в жидкой фазе биологических систем.

Робота виконана при фінансовій підтримці Государственного фонда фундаментальных исследований (ДФФД) Министерства образования и науки Украины (проект № Ф25.3/072).

- 1) Недоспасов А.А., Беда Н.В. Биогенные оксиды азота // Природа. – 2005. – № 7. – С. 35-42.
- 2) Wink D.A., Darbeshire J.F., Nims R.W., Saavedra J.E., Ford P.C. // Chem. Res. Toxicol.-1993.-V.6. - P. 23-27.
- 3) Захаров И.И., Колбасин А.И., Захарова О.И., Кравченко И.В., Дышиловой В.И. Квантово-химическое свидетельство существования нового изомера тетраоксида диазота // Теорет. и эксперим. химия. – 2008. – 44, № 1.

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НОВЫХ ХИМИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

Кац М.Д.

Рубежанский технологический институт Восточно-украинского национального университета им. В. Даля, kats@is.ua.

В данной работе приведено решение актуальной проблемы - построения моделей зависимости потребительских свойств химических соединений определенного класса от их химического строения. С помощью этих моделей появляется возможность решать задачи:

- прогноза свойств новых, еще не синтезированных химических соединений по их химическим формулам;
- формального синтеза химических формул новых соединений изучаемого класса, потенциально обладающих заданным комплексом потребительских свойств.

На примере дисперсных моноазокрасителей показана возможность решения приведенных выше задач для любых классов химических соединений.

В качестве методологической основы для построения модели «строение-свойства» был использован метод мозаичного портрета. [1]. Объект исследования – класс дисперсных моноазокрасителей, имеющих следующую структуру:

