ПРОГРАММА ОБРАБОТКИ СПЕКТРАЛЬНЫХ ДАННЫХ КОМПЛЕКСОВ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ

Скляр А.А., Болотин С.Н., Трудникова Н.С. Колечко Д.В.
Кубанский государственный университет, г. Краснодар

Скляр А.А.
Болотин С.Н.
Трудникова Н.С.
Колечко Д.В.
Кубанский государственный университет

Исследование жизненных процессов протекающих в организме человека и животных тем или иным образом подталкивает к более глубокому изучению комплексных соединений металлов с белками, упрощенной моделью которых являются соединения металлов с аминокислотами. Таким образом, исследование структуры и характеристик данных комплексов представляет большой интерес с точки зрения химии и биологии.

Ранее [1-3] нами был создан комплекс программ для обработки спектров ЭПР жидких растворов с целью получения данных о строении и свойствах парамагнитных комплексных частиц и представлены результаты иго использования [4, 5] комплексов меди(II) с аминокислотами.

Целью представляемого исследования было устранения ряда недостатков, выявленных в ходе использования упомянутых компьютерных программ, а также расширение ее возможностей.

Использование метода Сейса [6], имеющего линейного сходимость, для решения системы нелинейных уравнений в процедуре расчета мольных долей компонентов оправдано в случаях систем со сложным химическим равновесием, когда применение метода Ньютона-Рафсона не приводит к значительному выигрышу времени расчета из-за большого количества контролирующих процедур. Блок расчёта мольных долей компонентов системы был дополнен методом Бринкли, широко применяющемся для pH-потенциомерических расчетах и модифицированным нами для расчета при известной концентрации ионов водорода.

В блок оптимизации искомых параметров к методам сканирования и координатного спуска был добавлен градиентный метод поиска минимума функции с переменным шагом, что позволяет более точно и быстро находить искомые параметры в точке локального минимума функции $F = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\left(Y_i^{экс.} - Y_i^{теор.}\right)^2$.

Использование одного, пусть даже такого информативного метода как ЭПР спектроскопия, как правило недостаточно для рассмотрения сложных химических равновесий. Поэтому помимо обработки ЭПР спектров в программу добавлена возможность работы с оптическими спектрами, что, безусловно, расширяет рамки ее применения. Теоретический спектр строится по формуле Гаусса, а определяемыми параметрами, наряду со спектральными характеристиками, являются, как и в процедуре обработки спектров ЭПР константы устойчивости комплексных соединений.

Литература

1. *Николаенко И.А., Панюшкин В.Т., Болотин С.Н.* Свидетельство об официальной регистрации программы для ЭВМ № 2002610136. Программный комплекс расчета параметров спектров ЭПР комплексных соединений Cu(II) с различными органическими лигандами. Кубанский государственный университет, Краснодар (Россия), 2002.
2. *Заплатина Н.П., Панюшкин В.Т., Болотин С.Н.*. Свидетельство об официальной регистрации программы для ЭВМ №2003610193. Программа расчета равновесий многокомпонентных систем по данным спектров ЭПР, Кубанский государственный университет, Краснодар (Россия), 2003.
3. *Болотин С.Н., Николаенко А.И., Крюкова Н.П., Стаценко О.В.* // Сборник тезисов докладов первой национальной конференции «Информацинно-вычислительные технологии в решении фундаментальных проблем и прикладных задач химии, биологии, фармацевтики и медицины (ИВТН-2002)». – М., 2002. – С. 53-54.

4. *Болотин С.Н., Крюкова Н.П., Стаценко О.В., Колечко Д.В., Панюшкин В.Т.* // Сборник тезисов докладов «Информацинно-вычислительные технологии в решении фундаментальных проблем и прикладных задач химии, биологии, фармацевтики и медицины (ИВТН-2003)». – М., 2003. – С. 26.
5. *Крюкова Н.П., Болотин С.Н., Панюшкин В.Т.* // Известия АН. Серия химическая. 2003. N 5. С. 1060.
6. *Sayce I.G.* // Talanta. 1967. Vol. 15. N 12. P. 1397.