ДОСЛІДЖЕННЯ ВЛАСТИВОСТЕЙ МОДЕЛЬНИХ СПОЛУК ПАЛЬМІТИНОВОЇ КИСЛОТИ ТА ЇЇ СОЛЕЙ З ЛІТІЄМ, АБО З МАГНІЄМ. ВИЗНАЧИТИ ВЛАСТИВОСТІ, ВІДМІННОСТІ ТА МОЖЛИВІ ЗАСТОСУВАННЯ, ВИКОРИСТОВУЮЧИ ПРОГРАМУ HYPERCHEM V.8.

Шулятицький Ігор Васильович
здобувач другого (магістерського) рівня вищої освіти II курсу,
igorsul735@gmail.com
Житомирський державний університет імені Івана Франка, Україна

Віленський Володимир Олексійович
доктор хімічних наук, старший науковий співробітник.
volodymyr-vilensky@ukr.net
Житомирський державний університет імені Івана Франка, Україна

Основна мета роботи: розширення олігомерних реакційно здатних продуктів, які раніше не були об'єктами синтезу залучаючи технологію комп'ютерного моделювання HyperChem v.8. крім того метою роботи є дослідження не лише кислоти а й солі двух валентного металу

Обєктом дослідження є пальмітинова кислота та її солі магнію і літію На предмет створення нових реакційно здатних олігомерних продуктів на основі пальмітинової кислоти (ПМК) та її солей магнію (ПМСMg)і літію (ПМСLi).

Актуальність: комп'ютерна хімія а саме програма HyperChem v.8 . дає можливість обрахувати не лише загальну енергію молекули а й створювати графічне відображення результатів квантово-механічного розрахунку розподілу електростатичного потенціалу, електронної густини,можливе 2D та 3D зображення, показувати розраховані властивості обраного атома,групи атомів або молекули. Для молекул показані такі властивості як загальна енергія, дипольний момент, поляризуємість; для атомів –символ елемента, атомна маса, частковий заряд; для зв'язків – довжина і кратність зв'язку. Тому користуючись розрахунковими даними можемо визначити ймовірно можливий шлях синтезу олігомерних продуктів на основі пальмітинової кислоти та її солей магнію і літію. Особливої актуальності набувають дослідження комп'ютерної хімії сьогодні коли людство стоїть на межі екологічної катастрофи та потребує нових методів синтезу.

Першим етапом дослідження це визначення загальної енергії рівноважного стану ПМК молекул за умови найбільш вигідного розташування атомів. Розрахунки проводили за умови дії на ПМКсилового поля (MFF) методом Steepest Descents optimizer. Суть методу полягає в тому що система в межах градієнту знаходить локальний мінімум. З кожним наступним циклом розрахунку потенційна енергія ПМК зменшується, але й зменшується й сам градієнт. Тому в цілому даний механізм розрахунку досягає мінімуму енергію оптимізації системи за якої вплив складових структури атомів (зв'язки, кути, двогранні кути, електростатичні ефекти) буде найменшим. Нижче неведені попередні результати досліджень кислоти ПМК, та її солей СПМКLi, СПМКMg, MgПМКMgПМК:

Пальмітинова кислота Energy=7.932664 kcal/mol Gradient=0.095237

Пальміат літію Energy=9.224713 kcal/mol Gradient=0.007659

Пальміат магнію (з одним кислотним залишком) Energy=9.563255 kcal/mol Gradient=0.009748

Пальміат магнію (з двума кислотними залишками)

Energy=19.024291 kcal/mol Gradient=0.016625

Також за залученням програми HyperChem v.8 були обчислені такі величини для кожної з перелічених вище молекул

Bond –зв'язку; Angle – енергія валентного кута; Dihedral – енергія міжплощинного кута ; Vdw– сили вандервальсової взаємодії; Stretch-bend- енергія пружності; Electrostatic – електростатична взаємодія

Назва молекули	Bond	Angle	Dihedral	Vdw	Stretch-bend	Electrostatic	Energy
Пальмітинова кислота	0.715199	1.61289	-3.20459	8.5735	0.235667	0	7.932664
Пальміат літію	0.993563	1.42974	-0.753576	7.26376	0.29123	0	9.224713
Пальміат магнію (1)	0.988483	1.42723	-0.460654	7.31736	0.290845	0	9.563255
Пальміат магнію (2)	1.97936	2.91025	-1.02747	14.4944	0.583973	0.0837812.	19.02429

Перші висновки свідчать що кількість атомів що входять до складу системи та особливості їхньої взаємодії прямо пропорційний енергії системи. Тобто якщо додавати до системи другий кислотний залишок то загальна енергія системи збільшиться відповідно до кількості атомів які додали. У випадку коли у карбоксильній групі гідроген замінили на Li то збільшився радіус заміщеного атома та тип хімічної взаємодії між атомами, що і вплинуло на загальну енергію системи. Магній, що має більший радіус порівняно з літієм також очіковано сприяв новим змінам. Доказом того що кількість атомів напряму залежить від загальної енергії системи є значний внесок вандерваальсових сил взаємодії в загальну енергію системи. Подальшим напрямком роботи планується обчислення властивостей моделі за дії силового поля в певних температурному інтервалах.

1. INTRODUCTION TO COMPUTATIONAL CHEMISTRY LABORATORY. URL: https://www.tau.ac.il/~ephraim/intro2comp.pdf
2. POLYMER SCIENCE AND TECHNOLOGY. Volume 21 Modification 01 Polymers. URL: http://surl.li/drjek
3. GAUSSIAN 09W TUTORIAL AN INTRODUCTION TO COMPUTATIONAL CHEMISTRY USING G09W AND AVOGADRO SOFTWAREp.34.URL:http://surl.li/drjem
4. A GUIDE TO MOLECULAR MECHANICS AND QUANTUM CHEMICAL CALCULATIONSWARREN J. HEHREWAVEFUNCTION, INC. 18401 VON KARMAN AVE., SUITE 370. URL: http://surl.li/drjeq