

ИНТЕРПРЕТАЦИЯ ПОВЕДЕНИЯ СИСТЕМ МЕТОДАМИ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ХИМИИ

Колчина Г.Ю.^а, Мовсумзаде Э.М.^б

^а*Стерлитамакский филиал Башкирского государственного университета,
РБ, г. Стерлитамак, пр. Ленина 49,
e-mail: kolchina.GYu@mail.ru*

^б*Уфимский государственный нефтяной технический университет,
РБ, г. Уфа, ул. Космонавтов, 1*

Современная математическая химия обладает большим набором инструментов для проведения исследований молекулярных систем и физико-химических процессов, в частности, исследованных нами явлений в процессах нефтехимии, используя уравнения квантовой механики и математические методы. Объектами и предметами ее исследований явились молекулярные системы, находящиеся в основных и возбужденных состояниях, вещества в конденсированном состоянии, для которых установлены их геометрическое и электронное строение, механизмы и динамика переноса энергии и заряда при проведении химических процессов. Математическая химия, составляя основу современного учения о строении молекулярных систем и динамике их превращений, о строении и химических превращениях молекул в процессах добычи и переработки добываемого углеводородного сырья, способна оперировать более детальной и точной информацией о строении химического соединения, позволяя ей предсказывать и объяснять свойства молекулярных систем и их проявления, включая такие, которые неподвластны порой классической теории. Для получения результатов представлялось решение многоэлектронной задачи, что было возможно только с использованием упрощенных подходов. Математическая химия, основанная на применении компьютерных методов и дискретной математики, прежде всего, методов молекулярной механики и молекулярной динамики, методов линейной алгебры, теории графов, а также методов нелинейной динамики, решает задачи фундаментального и прикладного характера в нефтехимии, что является сегодня достаточно перспективным направлением. На основе представлений математической химии и методов квантовой механики стало возможным создание моделей строения и механизмов превращений химических соединений (изучение механизма действия присадок различного назначения к топливам и смазочным маслам). Являясь точной наукой, данный раздел химии дает полное математическое описание и оценку направления протекания химических реакций, расчета распределения зарядов в исследованных молекулах, определения равновесной геометрии сложных соединений и молекулярных комплексов, вычисления энергии межмолекулярных взаимодействий, которые оказывают определенное влияние на результаты процессов нефтепереработки.