

ВОЗМОЖНОСТЬ ЭКОЛОГИЗАЦИИ СИНТЕЗА β -ДИКЕТОНАТОВ ОДНОВАЛЕНТНЫХ МЕТАЛЛОВ НА БАЗЕ КОМБИНАТОРНО- ГРАФОВОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ МЕТОДОВ ИХ ПОЛУЧЕНИЯ

¹Шинкарёв К. А., магистрант

*Научные руководители*² Костюк Н.Н., Меженцев А.А.

¹Белорусский государственный университет, Беларусь

²Белорусский национальный технический университет, Беларусь

На базе комбинаторно-графового моделирования был создан симулятор методов синтеза β -дикетонатов одновалентных металлов. При расчете оптимального пути синтеза хелата также заложена возможность выбора наиболее экологически эффективного метода. Оптимизация экологичности метода синтеза базируется на требованиях и параметрах зелёной химии.

Ключевые слова: хемоинформатика, хелат, β -дикетонат, одновалентные металлы, экологизация, зелёная химия, летучесть, граф, моделирование

В настоящее время нашли широкое применение методы математического моделирования химических процессов. Это связано с тем, что проведение химического эксперимента требует, как правило, реактивов, дорогостоящего оборудования и квалифицированных кадров. Кроме высокой стоимости самого химического эксперимента, при его реализации образуются побочные продукты, которые нуждаются в утилизации. Проблемакратно возрастает при масштабировании химических процессов. С увеличением выпуска целевого продукта, соответственно, растёт объём побочных веществ или, проще говоря, отходов. Попутная наработка отходов в случае промышленного производства значительно обостряет проблему их утилизации. Ярким примером такой ситуации может служить деятельность Гомельского химического комбината. В результате его многолетней работы скопилось огромное количество фосфогипса. По оценкам специалистов, общая масса фосфогипса превышает 14 миллионов тонн [1], что в свою очередь представляет собой потенциальную экологическую опасность регионального уровня.

В связи с этим, одним из направлений современного развития химии является максимальная экологизация процессов получения новых веществ. Требования по экологизации химических процессов сформулированы в рамках «зелёной химии». К ним относятся в первую очередь Е-фактор и атомная эффективность, а также 14 дополнительных критериев [2]. Экологическая оптимизация реальных химических процессов в рамках зелёной химии может быть сопряжена с моделированием химических процессов.

Решение проблемы отходов химических производств лежит в плоскости, в первую очередь, оптимизации химического эксперимента. Частью оптимизации может служить математическое моделирование методов получения востребованных веществ [3], получаемых из отходов или иного сырья ещё на стадии организации производства. С этой целью нами осуществлена попытка создания симулятора синтеза хелатных соединений на базе β -дикетонатов одновалентных металлов.

Хелаты металлов были выбраны в качестве химических соединений для создания симулятора ввиду широкой востребованности данного класса соединений в научной деятельности и промышленности в настоящее время. Так, например, в промышленном масштабе β -дикетонаты переходных металлов используются для получения металлсодержащих покрытий на фасонных деталях. Как показано в работе [4], для осуществления CVD-процессов используются галогениды металлов, ареновые и карбонильные соединения металлов, а также β -дикетонаты металлов. Галогениды большинства переходных металлов содержат в своём составе кристаллогидратную воду, а безводные крайне неустойчивы на воздухе, так как поглощают влагу. Карбонильные и ареновые соединения металлов также являются не устойчивыми к влаге воздуха, причём карбонильные соединения могут просто разлагаться кислородом воздуха. Наиболее устойчивыми на воздухе, в отличие от всех перечисленных соединений, являются хелаты металлов, что и обуславливает их выбор в лабораторной практике и промышленном производстве.

В качестве решения комплексной задачи нами был создан симулятор синтеза β -дикетонаты металлов. Для максимального приближения работы симулятора к реальным химическим процессам, которые осуществляются в лабораториях институтов или цехах предприятия, в качестве исходных соединений пользователь может закладывать имеющиеся в его распоряжении исходные химические реагенты.

Симулятор синтеза хелатных соединений на основе β -дикетонатов металлов реализован на базе графового моделирования, так как любой химический синтез подразумевает некоторые состояния веществ и переходы между ними, что удобно представить в виде вершин и рёбер соответственно.

Все вершины графа можно разбить на 2 большие равные по количеству группы. К первой группе относятся вершины типа k , w , f , q . Они представляют собой неполные уравнения и схемы реакций получения β -дикетонатов металлов, будем называть их вершинами-реакциями. Второй тип вершин представляет собой целевой продукт – β -дикетонат металла. С химической точки зрения сложение двух вершин (k или $q + v$) даёт полноценное уравнение или схему реакции. Также каждый реагент любой реакции представляет вершины, которые назовём вершинами-источниками.

Заметим, что в некоторых реакциях хелаты также являются реагентами, а значит и вершинами-источниками.

Вершины типа k , w , f , q и вершины типа v связаны между собой рёбрами типа $e_1 - e_{46}$. Вес рёбер вычисляется исходя из следующих критериев:

1) препаративная состоятельность синтеза (ПСС). Данный критерий свидетельствует о степени сложности и продуктивности реакции;

2) зелёная химия (ЗХ) отражает степень экологичности используемой реакции;

3) синтез ультрачистых веществ (СУВ) характеризует возможность получения высокочистых соединений;

4) исключение гидролиза и гидратации целевого продукта (ИГГ) отражает фактическую необходимость получения безводных хелатов.

Каждая вершина-источник смежна с соответствующими вершинами-реакциями. Соединяющие их рёбра, являются рёбрами типа e_{46} , у которых все четыре вышеперечисленных критерия равны нулю.

Все рёбра графа являются направленными: от вершин-источников к вершинам-реакциям и от вершин-реакций к вершинам-продуктам, причём для конкретно взятой вершины-реакции, согласно построению, не может быть ситуации, когда одна из вершин-источников, совпадает с вершиной-продуктом, то есть мы имеем дело с простым ориентированным графом.

Получить хелат металла с заданным лигандом с помощью выбранного реагента оптимальным путём означает, что нужно найти путь между двумя данными химическими соединениями, который имеет минимальное количество рёбер и максимальный вес.

Для нахождения оптимального пути синтеза из вещества A в вещество B использовался алгоритм Дейкстры.

Для работы с графом в СУБД PostgreSQL была создана база данных. Поскольку объём данных велик, таблицы заполнялись автоматически с помощью вспомогательной программы на языке C#. Граф описывается списком рёбер, каждое из которых определяется двумя вершинами (источником и реакцией). Вершины разделены на две отдельные таблицы, так как источники и реакции имеют различные свойства. Также была создана таблица типов рёбер. В итоге граф представлен четырьмя таблицами.

Симулятор был реализован в виде программы на C# с интерфейсом, созданным с использованием технологии WPF.

Оптимизация химического эксперимента позволяет находить пути наиболее экономного получения химических целевых продуктов с уменьшением затрат на производство и минимизацией генерации побочных продуктов. Важным направлением оптимизации методов получения химических веществ, особенно на стадии проектирования процессов, является их математическое моделирование. На базе комбинаторно-графового подхода

нами были смоделированы процессы получения широко востребованных β -дикетонатов одновалентных металлов. Виртуальные синтезы могут быть осуществлены с учётом возможности получения ультрачистых соединений, а также параметров зелёной химии. Созданный симулятор может быть использован как в лабораторной практике НИИ и университетов, так и на предприятиях химической промышленности, которые осуществляют промышленный синтез хелатов.

Литература:

1. Зык В.В., Воробьёв Н.И. Извлечение РЗЭ из фосфогипса // Ресурсосберегающие и экологически чистые технологии: Тезисы доклада третьей научно-технической конференции – Гродно, 1998. – С.247-248.

2. Костюк Н.Н., Дик Т.А. Оценка методов синтеза хелатов переходных металлов в соответствии с параметрами зеленой химии // Ресурсо- и энергосберегающие технологии и оборудование, экологически безопасные технологии: Материалы международной научно-технической конференции – Минск, 26-28 ноября 2014 г., ч. 2, с. 188-190.

3. Введение в хемоинформатику: 5. Информатика химических реакций: учеб. пособие / И.И. Баскин, Т.И. Маджидов, А.А. Варнек. – Казань, Москва, Страсбург, 2020. – 238 с.

4. Сыркин, В.Г. CVD-метод. Химическая парофазная металлизация / В.Г. Сыркин - М.: Наука, 2000.- 496 с.

УДК 004.42:622.2

ЦИФРОВАЯ ПЛАТФОРМА ГЕОМИКС

Шкурганова М.А., студент

Научный руководитель Стасевич В.И.

Белорусский национальный технический университет, Беларусь

В данной статье рассматривается Цифровая платформа ГЕОМИКС, особое внимание уделяется описанию модулей платформы и их предназначению, а также предложены варианты внедрения продуктов программы на горнодобывающие предприятия Беларуси.

Ключевые слова: горно-геологические информационные системы, цифровая платформа, ГЕОМИКС, модуль, эффективное планирование горных работ.

Развитие инновационных технологий предоставляет новые возможности для оптимизации процессов в различных отраслях, включая горнодобывающую промышленность. В настоящее время эффективное планирование горных работ возможно при использовании горно-геологических информационных систем (далее – ГИС). В последние годы на предприятиях Республики Беларусь и