

Современные математические методы обработки колебательных спектров многоатомных молекул

Курамшина Г.М.

МГУ имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия
kuramshi@phys.chem.msu.ru

Повседневная практика спектроскопии и структурных исследований любого соединения или ряда родственных соединений предполагает использование разнообразных физических методов, привлечение результатов квантово-механических расчетов, анализ имеющихся в литературе данных и в ряде случаев решения обратных задач с использованием специализированных инструментов, направленных на извлечение или корректировку молекулярных параметров в соответствии с доступными экспериментальными данными. Спектроскопические и структурные исследования часто требуют серии симуляций типа «что, если», необходимых для выбора подходящей молекулярной модели или грубого предсказания свойств неизвестного химического соединения. Автоматизация физико-химических исследований на основе эксперимента колебательной спектроскопии придает особую значимость проблемам корректной обработки и интерпретации экспериментальных данных с использованием баз данных по молекулярным константам. При решении обратных задач, возникающих при обработке молекулярных спектров многоатомных молекул, в частности, при решении т.н. обратной колебательной задачи определения молекулярного силового поля помимо проблем, связанных с некорректностью математической задачи, возникают трудности, связанные с высокой размерностью задач (биологические молекулы могут включать от десятков до сотен и тысяч атомов), а также сложности, связанные с необходимостью учета динамического поведения рассматриваемых систем, характеризующихся сложным конформационным составом, наличием внутримолекулярных и межмолекулярных взаимодействий и т.д.

Предложенные в наших работах устойчивые алгоритмы для решения обратной колебательной задачи в рамках теории регуляризации нелинейных некорректных задач [1, 2, 3] позволяют учитывать специфику сложных молекулярных систем с помощью физически обоснованных ограничений на структуру матрицы силовых постоянных (вторых производных потенциальной энергии) на основе анализа результатов квантово-химических расчетов. Оригинальные алгоритмы расчета силовых полей многоатомных молекул в декартовых системах координат позволили преодолеть проблемы неоднозначности выбора систем обобщенных координат при анализе силовых полей сложных молекулярных систем.

Список литературы

1. *Yagola A.G., Kochikov I.V., Kuramshina G.M., Pentin Yu.A.* Inverse problems of vibrational spectroscopy. Walter de Gruyter GmbH Berlin, Boston, 2014.
2. *Kuramshina G.M., Weinhold F.A., Kochikov I.V., Pentin Yu.A., Yagola A.G.* Joint treatment of ab initio and experimental data in molecular force field calculations with tikhonov's method of regularization // *AJ. Chem. Phys.* 1994. V. 100. No. 2. P. 1414.
3. *Kochikov I., Stepanova A., Kuramshina G.* Some journal publication in English // *Molecules.* 2022. V. 27. No. 2. P. 427.