

0.1. Новиков Д.В., Каличкина Л.Е. Расчет кинетических параметров синтеза 4,5-дигидрокси-имидазолдин-2-тиона в условиях протекания побочных реакций

4,5-Дигидроксиимидазолидин-2-тион (ДГИТ) — гетероциклическое соединение, продукт взаимодействия тиомочевины с щавелевым альдегидом [1], является эффективным ингибитором коррозии, предшественником для синтеза ряда перспективных биологически активных соединений. Однако кинетика синтеза ДГИТ не описана, что затрудняет поиск оптимальных условий синтеза.

Кинетика исследована методом жидкостной хроматографии, спектроскопии ЯМР. Установлено, что в процессе синтеза протекают побочные реакции. Были предложены кинетические схемы протекающих реакций, на основе которых составлены мат. модели, представляющие собой системы ОДУ.

Далее решалась обратнокинетическая задача - по экспериментальным данным находились кинетические параметры, наилучшим образом описывающие эксперимент. Искомые кинетические параметры определялись как координаты минимума суммы квадратов отклонений экспериментальных и расчетных концентраций тиомочевины и ДГИТ. Поиск минимума проводился с помощью алгоритма Нелдера-Мида с многократным запуском.

Интегрирование ОДУ осуществлялось с помощью полуневяной двухстадийной L-устойчивой схемы Розенброка с комплексными коэффициентами [2]. Расчет проводился на серии сгущающихся сеток с апостериорной оценкой погрешности вычислений по методу Ричардсона [3, 4].

В рамках работы впервые удалось создать кинетические модели, хорошо описывающие кинетику синтеза ДГИТ в условиях протекания побочных реакций. Наблюдается хорошее совпадение расчетов с экспериментальными данными. Кинетические модели могут быть использованы для нахождения оптимальных условий синтеза вещества и моделирования процесса.

Научный руководитель — д.х.н. Князев А. С.

Список литературы

- [1] SINGH M., PARVARI G., VOTOSHANSKY M. ET AL. The Synthetic Challenge of Thioglycolurils // Eur. J. Org. Chem.. 2014. Vol. 2014. N. 5. P. 933–940
- [2] Альшин А.Б., Альшина Е.А. Об одной новой двухстадийной схеме Розенброка для дифференциально-алгебраических задач // Математическое моделирование. 2011. Т. 23. № 3. С. 139–160
- [3] Альшина Е. А., Калиткин Н. Н., Корякин П. В. Диагностика особенностей точного решения при расчетах с контролем точности // ЖВМ и МФ. 2005. Т. 45. № 10. С. 1837–1847
- [4] Калиткин Н. Н., Альшин А. Б., Альшина Е. А., Рогов Б. В. Вычисления на квазиравномерных сетках // М: Физматлит, 2015. 224 с.