

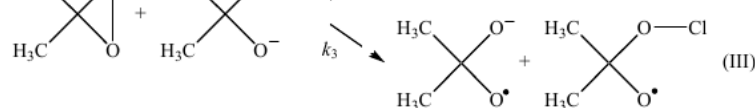
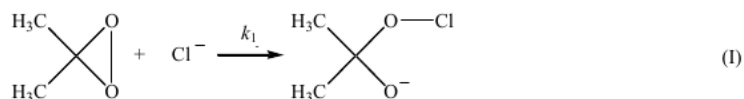
Моделирование генерации синглетного кислорода при разложении диметилдиоксирана с использованием технологии OpenMP

М.Ю. Овчинников¹, А.А. Юнусов², С.Л. Хурсан¹, И.М. Губайдуллин³

Институт органической химии УНЦ РАН¹, ГОУ ВПО БашГУ², Институт нефтехимии и катализа РАН³

Синглетный кислород 1O_2 на протяжении многих лет привлекает внимание исследователей ввиду его существенной роли в органическом синтезе, биологических процессах и хемилюминесцентных реакциях. Ранее было обнаружено, что распад диоксиранов, катализированный рядом анионов (Cl^- , Br^- , I^- , $t-BuO^-$, O_2^- и OH^-), сопровождается высокоэффективной генерацией 1O_2 . Данный факт позволяет рассматривать систему диоксиран-нуклеофильный ион как перспективную в химических лазерах и органическом синтезе.

Была предложена схема взаимодействия ДМД (диметилдиоксирана) с хлорид-ионом, изображенная на рисунке.



Одной из особенностей данной системы является то, что во время проведения эксперимента единственной измеряемой величиной являлась интенсивность хемилюминесценции, определяемая по формуле

$$I_{cl} = \phi_{cl} w = \phi_{cl} k [Cl^-] [DMD],$$

а не концентрации участвующих веществ.

Использование кинетического подхода в приближении метода квазистационарных концентраций позволило получить численное значение константы скорости k_1 и отношение констант k_2/k_3 . Ввиду того, что значения констант k_2 и k_3 при данном подходе определить невозможно, было решено использовать подход обратных задач химической кинетики.

Обратная задача химической кинетики состоит в нахождении констант и активационных параметров по экспериментальным данным при известной системе дифференциальных уравнений, описывающих поведение системы. Она подразумевает решение большого количества прямых задач, заключающихся в решении системы обыкновенных дифференциальных уравнений. Ввиду этого, эта задача обладает большим потенциалом распараллеливания, к тому же, следующей задачей исследования является определение активационных параметров, для решения которой необходимо определить константы для определенного набора температур.

Применение подхода обратных задач и параллельных технологий позволило разделить константы, определить их с более высокой точностью. К тому же данный подход масштабируем на системы, описываемые более сложными системами дифференциальных уравнений, которые не имеют решения в аналитическом виде.