

А. А. ЗЕНКИН, Ю. А. УСТЫНЮК, Н. Н. ФЕДОСЕЕВА

СТАНДАРТИЗАЦИЯ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ ИНФОРМАЦИИ О ГЕОМЕТРИИ МОЛЕКУЛЯРНЫХ СИСТЕМ

(Представлено академиком О. А. Реутовым 28 VI 1974)

В связи с резким увеличением объема вычислительной информации в химии в последние годы уделяется большое внимание разработке автоматизированных систем сбора, хранения и обработки химической информации.

Одним из важнейших видов химической информации, используемой в любых физико-химических исследованиях, проводимых на молекулярном уровне, является информация о геометрии, строении молекулярных систем (м.с.) Наиболее удобной, экономной и универсальной формой хранения такого рода информации являются декартовы координаты атомов м.с.: если последние известны, то с помощью набора стандартных программ ⁽¹⁾ можно автоматически вычислить любые внутренние параметры м.с.: любые межатомные расстояния, любые плоские и двугранные углы. Однако значения координат атомов м.с. не инвариантны относительно выбора системы координат. Как правило, даже в рамках одного и того же алгоритма расчета координат (в зависимости от порядка записи исходной информации) получают различные наборы значений координат атомов м.с. (т.е. относительно различных положений координатной системы), что существенно затрудняет последующий анализ и сравнение физико-химических результатов, полученных различными авторами.

В рамках автоматизированной системы управления моделями м.с. ⁽¹⁾ разработан и программно реализован метод стандартизации представления информации о геометрии м.с. Основная идея метода заключается в следующем.

С помощью универсального алгоритма расчета декартовых координат атомов произвольных м.с., не требующего в общем случае знания двугранных углов ⁽²⁾, — как известно, вычисление последних представляет собой основную трудность в такого рода расчетах, — автоматически вычисляются декартовы координаты атомов, т.е. строится математическая модель м.с. В зависимости от выбранного маршрута обхода подвижной системы по м.с. мы будем получать различные (с точностью до движения в пространстве) математические модели одной и той же м.с. Для любой построенной таким образом математической модели м.с. в старой координатной системе (X, Y, Z) автоматически рассчитываются главные моменты инерции и главные векторы м.с. Последние упорядочиваются согласно условию $I_1 < I_2 < I_3$, где I_j ($j=1, 2, 3$) — главные моменты инерции м.с., — и в этом их порядке главные векторы принимаются за новую координатную систему (X', Y', Z') . Затем старая система (X, Y, Z) автоматически совмещается с новой (X', Y', Z') , и мы получаем стандартный набор координат атомов (стандартную математическую модель) м.с. в системе ее главных осей.

Если теперь условиться смотреть на стандартную математическую модель м.с. с конца оси Z' так, чтобы видеть ось X' идущей вправо, а ось Y' — вверх, то при выводе изображения на экран дисплея мы увидим одно и то же изображение м.с., независимо от того, в какой исходной системе первоначально были рассчитаны координаты атомов м.с. Очевидно, и набор

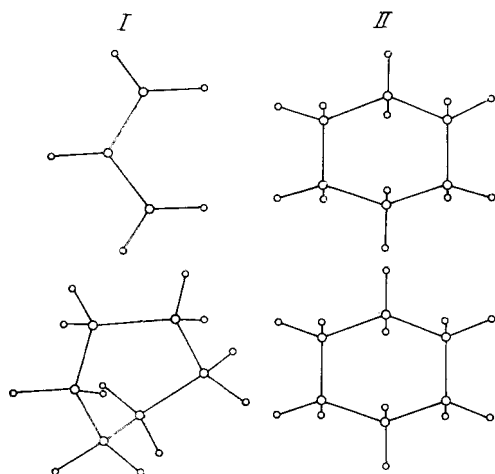


Рис. 1. Модель м.с. циклогексана в конформации «ванна». Здесь и на рис. 2: *I* — в произвольных системах координат, *II* — после стандартизации

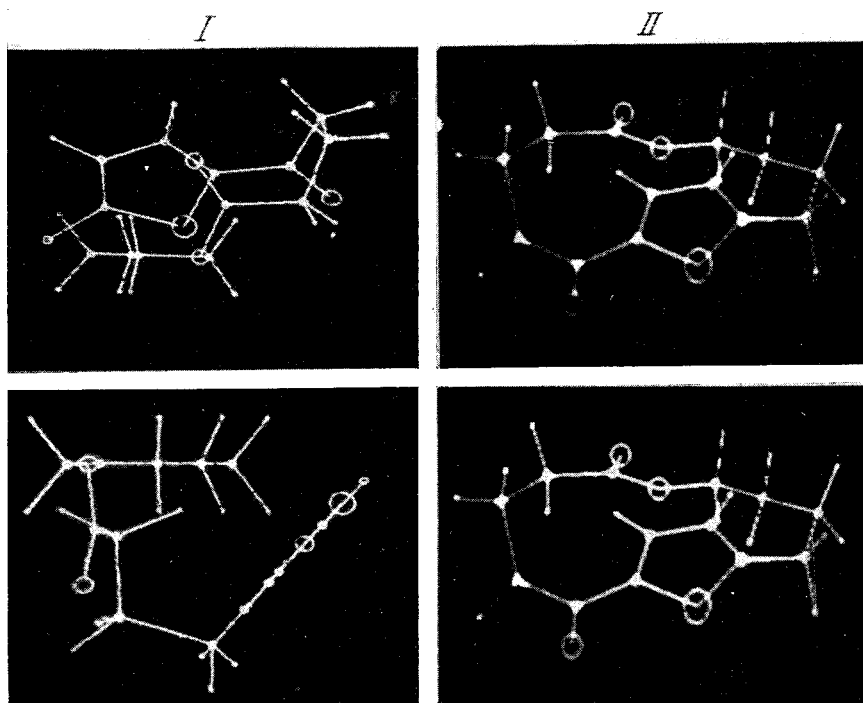


Рис. 2. Модель макроциклического кетолактона

координат атомов в системе (X', Y', Z') будет одним и тем же для любых исходных математических моделей рассматриваемой м.с.

На рис. 1 и 2 приведены фотографии, снятые с экрана дисплея, математических моделей м.с. циклогексана и макроциклического кетолактона: слева — в произвольных системах координат, справа — после стандартизации. Если слева два изображения имеют между собой очень мало общего, то после стандартизации эти изображения оказываются полностью идентичными.

Автоматизированная система управления моделями м.с. позволяет, конечно, вывести на экран дисплея в стандартной форме и полную информа-

цию о геометрии м.с., а именно, в виде трех проекций м.с. на координатные плоскости системы главных осей (X' , Y' , Z').

Унификация размеров и масштаба такого изображения позволяет получить очень удобную «визитную карточку» м.с. в виде стандартного микрофильма. Поскольку координаты элементов точечного множества (м.с.) однозначно восстанавливаются по трем его проекциям на координатные плоскости, такой микрофильм одновременно содержит и полную количественную информацию о геометрии м.с. (¹).

Предложенный метод стандартизации является удобным средством представления информации о строении м.с. при публикации журнальных статей, а также при организации автоматизированных систем хранения и обработки химической информации.

Авторы выражают благодарность Ю. И. Торгову и Л. А. Емельяновой за любезно предоставленную возможность использовать систему «Экран» ВЦ АН СССР для вывода на дисплей изображений моделей м.с.

Московский государственный университет
им. М. В. Ломоносова

Поступило
28 VI 1974

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

¹ А. А. Зенкин, Кандидатская диссертация, МГУ, 1974. ² А. А. Зенкин, Г. Л. Щембелов, Ю. А. Устынюк, В сборн. Матер. I Всесоюзн. конфер. по динамической стереохимии и конформационному анализу, Одесса, 1970, стр. 43.