

КОМПЬЮТЕРНОЕ ПЛАНИРОВАНИЕ МНОГОСТАДИЙНОГО СИНТЕЗА

В.А.Щелов, А.А.Мельников, В.А.Палюлин, Н.С.Зефирова

Химический факультет МГУ имени М.В.Ломоносова, Москва

Рациональное планирование многостадийного синтеза органических соединений является важной проблемой современной химической науки. Доминирующим фактором часто является не факт получения вещества, а эффективность предложенной синтетической схемы, обеспечивающей максимальный выход, минимальное количество стадий, наименьшие затраты на реагенты. Для достижения высоких результатов необходимо рассмотрение большого количества альтернативных путей синтеза. Одним из эффективных путей планирования синтеза является использование программ компьютерного синтеза. К настоящему времени разработан ряд таких программ, однако, несмотря на значительные успехи, существующие программы не лишены определенных недостатков, которых мы постарались избежать при разработке рассматриваемого в данном сообщении программного обеспечения.

Нами разработана система, в автоматическом режиме формирующая трансформы на основе баз органических реакций, что позволило значительно расширить базу синтетических правил для планирования синтеза по сравнению с программами, в которые такие правила вводились вручную при их создании. Сформирована база реакций, по которой проведено обучение и тестирование созданной программы. Предложен способ оценки эффективности предлагаемых превращений на каждой стадии, что потенциально позволяет оценить приемлемость всей синтетической схемы и выбрать наиболее подходящий путь для синтеза целевой структуры.