

УДК 53.01

## **Теоретическое исследование корреляции "структура—свойства" в рамках методов ПНС-, квазиПНС и ЭП-матриц**

*Н. Н. Сидамонидзе, К. Т. Купатадзе, М. И. Гвердцители*  
Тбилисский государственный университет, г. Тбилиси, Грузия

*На базе теории графов рассмотрены строение и физико-химический смысл ПНС (порядковый номер связь)-матриц, квазиПНС-матриц (являются видоизмененным вариантом ПНС-матрицы) и ЭП-матриц (электроотрицательность-полярность). Десятичные логарифмы*

---

© Сидамонидзе Н. Н., Купатадзе К. Т., Гвердцители М. И., 2009

**рифмы значения детерминантов этих матриц являются эффективными топологическими индексами для построения и исследования корреляционных уравнений "строение— физико-химические свойства". Показана высокая точность полученных корреляций.**

PACS: 02.90.+p

*Ключевые слова:* теория графов, ПНС(порядковый номер связь)-матрицы, квазиПНС-матрицы, ЭК(электроотрицательность-полярность)-матрицы, корреляционные уравнения.

### Введение

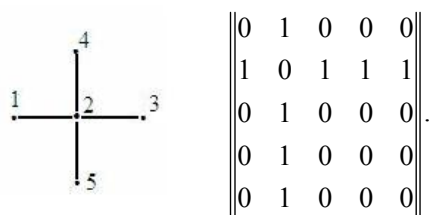
Теория графов широко используется для решения многих важных задач естественных наук — физики, химии, биологии [1—2]. В данной работе рассмотрена возможность использования введенных на базе графов понятий ПНС-матриц (порядковый номер связь), квазиПНС-матриц и ЭП-матриц для изучения корреляции "структура— свойства" ряда молекул.

### Обзор литературы и обозначения

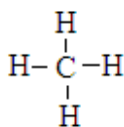
Граф  $G(v, x)$  — фигура, которая состоит из конечного множества  $V$ -содержащих  $p$  вершин, и конечного множества  $X$ , содержащих по-разному соединенных пар вершин  $(u, v)$ ; соединенные вершины  $q(u, v)$  называются ребрами.

Граф можно сопоставить с определенной молекулой (точнее, структуру молекулы можно выразить с помощью графа). В таком случае граф называют молекулярным [3, 4].

Матрица смежности часто используется для алгебраической характеристики молекулярного графа. Матрица смежности квадратная, ее диагональными элементами являются 0, недиагональными — 0 или 1 (если две вершины связаны-смежные-1, если не связаны-несмежные-0). Ниже приведены граф и соответствующая матрица смежности (справа):



Заметим, что этот граф соответствует структуре молекулы метана  $CH_4$ , а также родственным по строению молекулам типа  $CCl_4, CF_4$  и т. п.



ПНС-, квазиПНС- и ЭП- матрицы являются модифицированными матрицами смежности [5]. Диагональными элементами ПНС-матриц являются порядковые номера химических элементов,

входящие в молекулу, недиагональными элементами — кратности химических связей. Для любой трехатомной молекулы ABC соответствующая ПНС-матрица имеет вид:

$$\begin{matrix} & \begin{matrix} 1 & 2 & 3 \\ A & B & C \end{matrix} & \begin{pmatrix} Z_A & \Delta_{AB} & \Delta_{AC} \\ \Delta_{AB} & Z_B & \Delta_{BC} \\ \Delta_{AC} & \Delta_{BC} & Z_C \end{pmatrix}, \end{matrix}$$

где  $Z_A, Z_B, Z_C$  — порядковые номера химических элементов A, B, C;

$\Delta_{AB}, \Delta_{AC}, \Delta_{BC}$  — кратности связей A~B, A~C, B~C.

Например, молекуле  $H_2O$  соответствует ПНС-матрица

$$\begin{matrix} & \begin{matrix} 1 & 2 & 3 \\ H & O & H \end{matrix} & \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 8 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}. \end{matrix}$$

Первый столбец матрицы соответствует водороду "1", второй — кислороду "2", третий — водороду "3". Диагональными элементами (1, 8 и 1) являются порядковые номера водородов и кислорода, недиагональный элемент "1" указывает на то, что связи между водородом и кислородом простые; "0" — указывает, что атомы водородов не связаны.

КвазиПНС-матрица ( $\tilde{ПНС}$ ) является видоизмененным вариантом ПНС-матрицы. Диагональными

элементами  $\tilde{ПНС}$ -матрицы являются суммы порядковых номеров атомов химических элементов, входящие в структурные фрагменты молекул (т. н. "квазиатомы"); недиагональными — кратности химических связей между этими фрагментами

(Таким образом,  $\tilde{ПНС}$ -матрица строится на основании молекулярной модели).

Диагональными элементами ЭП-матриц являются электроотрицательности химических элементов, входящих в молекулу; недиагональными элементами — полярности химических связей.

### Логарифмы детерминантов матриц

Для любой трехатомной молекулы ABC соответствующая ЭП-матрица имеет вид

$$\begin{array}{ccc} 1 & 2 & 3 \\ \text{A} & \text{B} & \text{C} \end{array} \begin{array}{|c|c|c|} \hline \chi_A & \mu_{AB} & \mu_{AC} \\ \hline \mu_{AB} & \chi_B & \mu_{BC} \\ \hline \mu_{AC} & \mu_{BC} & \chi_C \\ \hline \end{array},$$

где  $\chi_A, \chi_B, \chi_C$  — электроотрицательности химических элементов А, В, С;

$\mu_{AB}, \mu_{AC}, \mu_{BC}$  — полярности связей А~В, А~С, В~С.

Топологическими индексами (или молекулярными дескрипторами) [6] называются алгебраические конструкции, которые характеризуют молекулярные графы (соответственные молекулы) и не зависят от порядка нумерации вершин графа (т. е. атомов в молекуле). Десятичные логарифмы значений детерминантов ПНС, ПНС и ЭП-матриц:  $\lg(\Delta_{\text{ПНС}})$ ,  $\lg(\Delta_{\text{ПНС}})$  и  $\lg(\Delta_{\text{ЭП}})$  являются топологическими индексами. На основе этих индексов можно сконструировать корреляционные уравнения:  $p = a \lg(\Delta_{\text{ПНС}}) + b$ ,  $p = a' \lg(\Delta_{\text{ПНС}}) + b'$ ,  $p = a'' \lg(\Delta_{\text{ЭП}}) + b''$  (где  $p$  — физико-химические свойства соединений) и провести теоретическое исследование разных классов химических соединений.

Для нормальных (неразветвленных) алканов корреляционное уравнение  $S_{298}^0 \sim \lg(\Delta_{\text{ПНС}})$  имеет вид

$$S_{298}^0 = 7,10 \lg(\Delta_{\text{ПНС}}) + 40,37.$$

Коэффициент корреляции (характеризующий степень достоверности графа) при этом равен:  $r = 0,999$ .

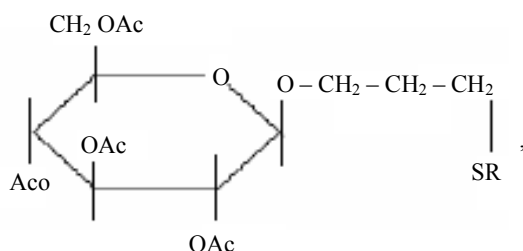
Таким образом, по критерию Джаффе [7], корреляция "блестящая". В случае использования  $\lg(\Delta_{\text{ЭП}})$  корреляционное уравнение  $S_{298}^0 \sim \lg(\Delta_{\text{ЭП}})$  для нормальных алканов имеет вид:

$$S_{298}^0 = 9,19 \lg(\Delta_{\text{ЭП}}) + 30,96.$$

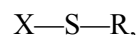
Коэффициент корреляции  $r$  при этом равен 0,995.

Таким образом, по критерию Джаффе, и здесь корреляция "блестящая".

Для серасодержащих о-глюкозидов типа:



где  $R = C_2H_5, C_3H_7, C_4H_9, \dots$  разработана простая структурная модель:



где X — углеводный фрагмент;

S — сера;

R — радикалы.

Построены корреляционные уравнения:

$$T_{\text{пл}} = 82,76 \lg(\Delta_{\text{ПНС}}) - 280,07$$

$$\text{и } R_f = 1,24 \lg(\Delta_{\text{ПНС}}) - 5,62.$$

Коэффициенты корреляции  $r$  равны 0,984 и 0,986.

Таким образом, по критериям Джаффе, корреляции удовлетворительны.

### Заключение

Приведенные результаты позволяют заключить, что  $\lg(\Delta_{\text{ПНС}})$ ,  $\lg(\Delta_{\text{ПНС}})$  и  $\lg(\Delta_{\text{ЭП}})$  являются

эффективными топологическими индексами для выявления корреляции "структура—свойства" для различных классов органических соединений, и на их основании можно построить и исследовать корреляционные уравнения.

### Литература

1. Оре О. Теория графов. — М.: Наука, 1980.
2. Харари Ф. Теория графов. — М.: Наука, 1975.
3. Яцимирский К. Б. Применение теории графов в химии. — Киев: Наукова думка, 1975.
4. Ed. Balaban A. T. Chemical application of Graph Theory. London, 1976.
5. Gverdtseteli M., Gamziani G., Gverdtseteli I. The Contiguity Matrices of Molecular graphs and their Modifications. — Tbilisi: Tbil. Univ. Press, 1996.
6. Gamziani G., Kobakhidze N., Gverdtseteli M. Topologic Indexes. — Tbilisi: Tbil. Univ. Press, 1995.
7. Gverdtseteli M. // Physical Organic Chemistry. — Tbilisi: Tbil. Univ. Press, 1982.

Статья поступила в редакцию 17 января 2008 г.

---

## Theoretical investigation of correlation “structure—properties” within the scope of ANB-, Quasi-ANB- and EP-matrices methods

*N. N. Sidamonidze, K. T. Kupatadze, M. I. Gverdtsiteli*

Tbilisi State University, Ilia Chavchavadze Ave., I TSU building, Tbilisi 0128, Georgia

E-mail: science@tsu.ge

*The structure and physical-chemical sense of ANB-, Quasi-ANB- and EP-matrices are considered. The decimal logarithms of the values of the determinants of these matrices are effective topologic indexes for construction of the correlation equations “structure—physical-chemical properties”. The high precision obtained in correlations was shown.*

PACS: 02.90.+p

*Keywords:* theory of count, ANB-, Quasi-ANB- and EP-matrices methods, the correlation equations.

---

**Сидамонидзе Н. Н.**, профессор

**Гвердцители М. И.**, профессор

**Купатадзе К. Т.**, профессор

Tbilisi State University, Ilia Chavchavadze Ave., I TSU building, Tbilisi 0128, Georgia

E-mail: science@tsu.ge