

МОДЕЛИРОВАНИЕ СВЯЗИ МЕЖДУ СТРУКТУРОЙ И ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИМИ СВОЙСТВАМИ УГЛЕВОДОРОДОВ НА ОСНОВЕ СПЕКТРАЛЬНОЙ ТЕОРИИ ГРАФОВ

Медведев Д.Ю., Скворцова М.И., Соломонова Е.В.

МИРЭА - Российский технологический университет (Институт тонких химических технологий имени М.В. Ломоносова), Россия, 119571, г. Москва, пр-т Вернадского, 86

Медведев Дмитрий Юрьевич, e-mail: 18022003-dima@mail.ru Скворцова Мария

Ивановна, e-mail: skvorivan@mail.ru Соломонова Екатерина Валерьевна, e-mail:

katrin-vaso@yandex.ru

Проблема математического моделирования связи между структурой и свойствами химических соединений – это важнейшая задача современной теоретической и компьютерной химии. Основная цель построения таких моделей – прогнозирование свойств химических соединений непосредственно по их структуре, при помощи полученного уравнения, минуя эксперимент. Наиболее часто в подобных исследованиях молекулы представляют в виде графов, а для количественного описания структуры молекул используют инварианты этих графов. Следует отметить, что при этом возникают проблемы выбора способа построения молекулярных графов, их инвариантов, а также вида уравнения, описывающего связь «структура-свойство», из бесконечного множества возможных вариантов.

В работе показано, что для ряда физико-химических свойств алканов (температуры кипения, молярного объема, молярной рефракции, теплоты парообразования, критической температуры, критического давления, поверхностного натяжения) могут быть построены достаточно точные модели связи «структура-свойство», в которых в качестве молекулярных параметров используются исключительно инварианты спектрального типа, вычисляемые для соответствующих молекулярных графов. Эти инварианты задаются при помощи некоторых симметричных функций от собственных чисел определенных матриц графов. В качестве таких матриц рассмотрены, в частности, матрицы смежности, расстояний, Кирхгофа и др. Для матриц каждого типа построены как линейные, так и нелинейные модели. Установлено, что наилучший результат при таком моделировании дает матрица смежности графа. На основе статистического анализа частот встречаемости различных инвариантов в построенных корреляциях выявлены наиболее «популярные» параметры и предложено качественное объяснение этим фактам. Кроме того, показано, что использование для построения корреляций одновременно всех инвариантов всех рассмотренных матриц позволяет улучшить результаты, получаемые для каждой матрицы отдельно.

Предлагаемый подход к построению корреляций «структура-свойство» допускает обобщение путем расширения перечня как используемых спектральных инвариантов, так и матриц молекулярных графов. Разработанная методика моделирования связи «структура-свойство» может быть применена к органическим соединениям любого класса и любым свойствам, измеряемым количественно.