

РАСЧЕТ ТОПОЛОГИЧЕСКИХ ИНДЕКСОВ СИММЕТРИИ
ОКРЕСТНОСТИ МОЛЕКУЛЫ АНГИДРИДА
БИЦИКЛО[2.2.1]-ГЕПТ-5-ЕН-2,3-ДИКАРБОНОВОЙ КИСЛОТЫ

М.С.САЛАХОВ¹, А.М.МАГЕРРАМОВ²,
Б.Т. БАГМАНОВ¹, О.Т.ГРЕЧКИНА¹

¹Институт Полимерных Материалов НАН Азербайджана

²Бакинский Государственный Университет

E-mail: salahov_mustafa@mail.ru

Впервые рассчитаны топологические индексы информационного содержания графа относительно окрестности k -го порядка (IC_k), полного информационного содержания (TIC_k), структурного информационного содержания (SIC_k), информационного содержания связывания (BIC_k) и комплементарного информационного содержания (CIC_k) для молекулы ангидрида бицикло [2.2.1]-гепт-5-ен-2,3-дикарбоновой кислоты.

Для установления соотношений структура - свойство используются достаточно формальные и простые методы, основанные на описании строения молекулы структурной формулой [1]. При таком топологическом способе описания молекулярного строения учитывают лишь типы атомов и характер их связывания, но пренебрегают метрическими характеристиками молекулы. Такой топологический способ описания строения может вполне охарактеризовать соединение, так как известно, что многие свойства соединений являются следствиями схемы связанности атомов в молекуле [2]. В наше время теоретико-графовые и топологические представления приобретают всевозрастающую роль в исследовании строения и свойств химических соединений. Не смотря на то, что при описании молекулы с помощью графа теряются стереохимические особенности молекулярной структуры, графы описывают полную топологию молекулы. При теоретико-графовом описании отражаются те особенности молекулярного строения, которые зависят от связности в противоположность свойствам, обусловленным геометрическим расположением атомов в пространстве. Поэтому химические графы являются топологическими, а не геометрическими представлениями молекулярных структур [3].

Информационное содержание графа может являться количественной мерой его структурной модификации. Для описания структуры молекул широко используются топологические индексы, получаемые в основном путем преобразования молекулярного графа в число [1].

Различные топологические индексы в значительной степени коррелируют с физико-химическими и биологическими свойствами разнообразных групп молекул [4,5].

Индексы симметрии окрестности получают при рассмотрении окрестностей вершин химических графов. Множество соответствующих элементов, полученных из графа, разбивается на основе отношений эквивалентности на непересекающиеся подмножества и для расчета информационного содержания используется формула Шеннона (1)[2].

$$\text{Информационное содержание} = -p_i \log_2 p_i \text{ бит, где } p_i = n_i/n \text{ (} i=1,2,\dots,h \text{)} \quad (1)$$

Согласно отношению эквивалентности, две вершины принадлежат одному классу эквивалентности, если они имеют одинаковую кратность ребер и одно и тоже число соседей первого порядка с одинаковыми степенями.

Информационное содержание графа относительно окрестности k -го порядка (IC_k) в расчете на одну вершину вычисляется по уравнению (2) [6,7]. При подходе, основанном на теории информации, множество A из n элементов, полученное из молекулярного графа, разбивается на h непересекающихся подмножеств A_i мощности n_i .

$$IC_k = - \sum_{i=1}^h p_i \log_2 p_i \quad (2)$$

Полное информационное содержание (TIC_k), структурное информационное содержание (SIC_k), информационное содержание связывания (BIC_k) и комбинентарное информационное содержание (CIC_k) рассчитываются по формулам:

$$TIC_k = n \cdot IC_k \quad (3)$$

$$SIC_k = IC_k / \log_2 n \quad (4)$$

$$BIC_k = IC_k / \log_2 N \quad (5)$$

$$CIC_k = \log_2 n - IC_k \quad (6),$$

где n - мощность множества вершин и N - полное число ребер (ковалентных связей) [2].

Информационное содержание графа можно рассматривать как количественную меру их относительной сложности. Например, для окрестности данного порядка IC_k максимально, когда все вершины различны, а для наиболее симметричного графа IC_k равно нулю.

В данной работе, используя формулы 2,3,4,5,6, рассчитаны индексы информационного содержания графа относительно окрестности k -го порядка (IC_k), полного информационного содержания (TIC_k), структурного информационного содержания (SIC_k), информационного содержания связывания (BIC_k) и комбинентарного информационного содержания (CIC_k) для молекулы ангидрида бицикло[2.2.1]-гепт-5-ен-2,3-дикарбоновой кислоты (БГДК) (рис.1), являющейся предметом наших систематических исследований по их реакционной способности [8,9,10,11,12].

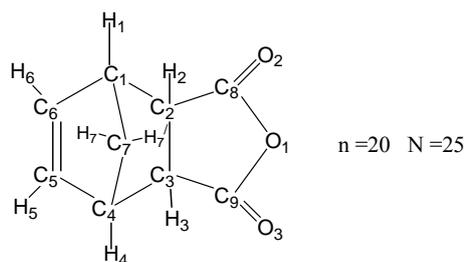


Рис.1 Молекула ангидрида БГДК.

Нулевой порядок $k=0$:

$H_1, H_2, H_3, H_4, H_5, H_6, H_7, H_7'$ $p=8/20$
 $C_1, C_2, C_3, C_4, C_5, C_6, C_7, C_8, C_9$ $p=9/20$
 O_1, O_2, O_3 $p=3/20$

$$IC_0 = -\left(\frac{9}{20} \log_2(9/20) + \frac{8}{20} \log_2(8/20) + \frac{3}{20} \log_2(3/20)\right) = 1,4577218$$

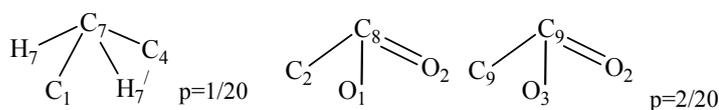
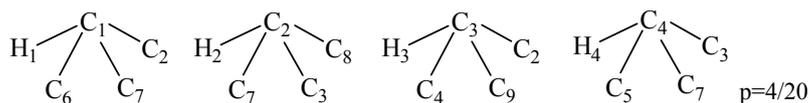
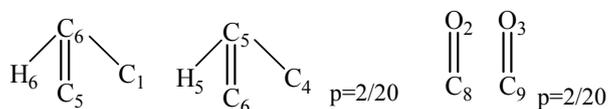
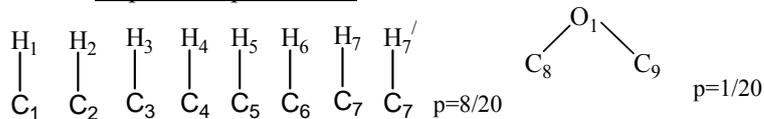
$$TIC_0 = 20 \cdot IC_0 = 20 \cdot 1,4577218 = 29,154436$$

$$SIC_0 = 1,4577218 / \log_2 20 = 1,4577218 / 4,321928 = 0,337285.$$

$$BIC_0 = 1,4577218 / \log_2 25 = 1,4577218 / 4,643856 = 0,313903$$

$$CIC_0 = \log_2 20 - IC_0 = 4,321928 - 1,4577218 = 2,8642062$$

Первый порядок $k=1$:



$$IC_1 = 2,4219285$$

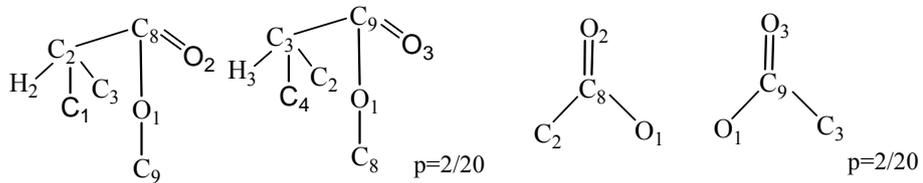
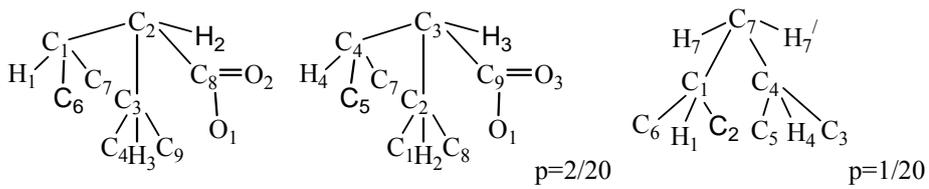
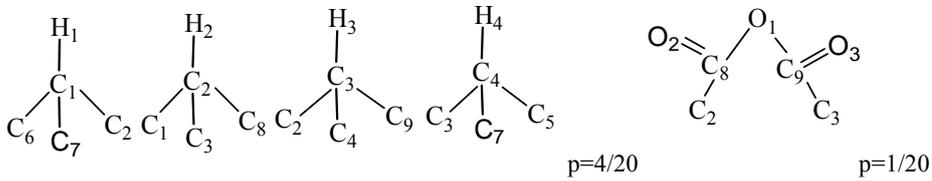
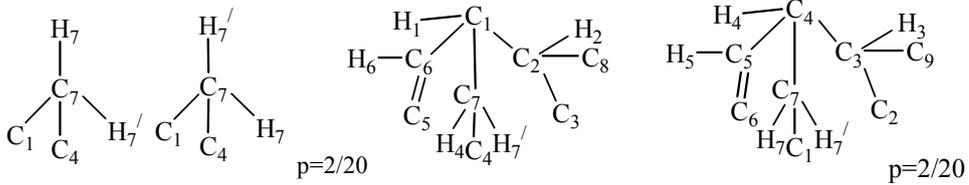
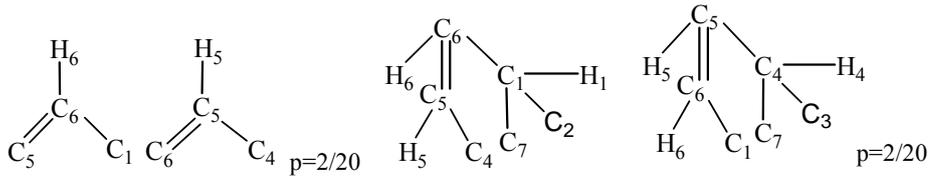
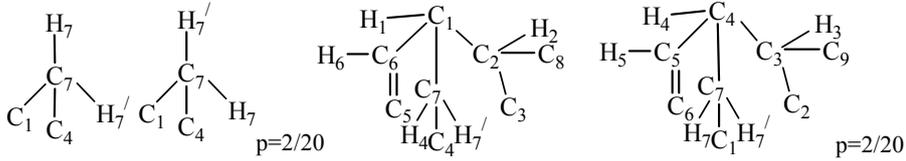
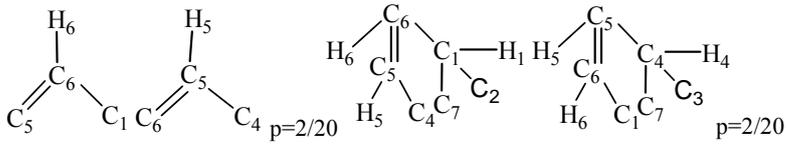
$$TIC_1 = 20 \cdot IC_1 = 20 \cdot 2,4219285 = 48,43857$$

$$SIC_1 = 2,4219285 / \log_2 20 = 2,4219285 / 4,321928 = 0,5597698$$

$$BIC_1 = 2,4219285 / \log_2 25 = 2,4219285 / 4,643856 = 0,520965$$

$$CIC_1 = \log_2 20 - 2,4219285 = 4,321928 - 2,4219285 = 1,902643$$

Второй порядок $k=2$:



$IC_2 = 3,221889$
 $TIC_2 = 64,43778$
 $SIC_2 = 0,7454749$
 $BIC_2 = 0,6937941$
 $CIC_2 = 1,100039$

В таблице 1 приведены эквивалентные вершины, вероятности и рассчитанные значения IC_k , TIC_k , CIC_k , SIC_k и BIC_k ($k=0-2$) для ангидрида БГДК.

Таблица 1

Эквивалентные вершины, вероятности и значения IC_k , TIC_k , CIC_k , SIC_k и BIC_k для ангидрида БГДК

порядок	эквивалентные вершины	вероятность p_i	IC_k	TIC_k	CIC_k	SIC_k	BIC_k
нулевой	(H ₁ ,H ₂ ,H ₃ ,H ₄ , H ₅ ,H ₆ ,H ₇ ,H ₇ [′])	8/20	1,4577218	29,154436	2,8642062	0,337285	0,313903
	(C ₁ ,C ₂ ,C ₃ ,C ₄ ,C ₅ , C ₆ ,C ₇ ,C ₈ ,C ₉)	9/20					
	(O ₁ ,O ₂ ,O ₃)	3/20					
первый	(H ₁ ,H ₂ ,H ₃ ,H ₄ , H ₅ ,H ₆ ,H ₇ ,H ₇ [′])	8/20	2,4219285	48,43857	1,902643	0,5597698	0,520965
	(C ₅ , C ₆)	2/20					
	(C ₁ ,C ₂ ,C ₃ ,C ₄)	4/20					
	(C ₇)	1/20					
	(C ₈ ,C ₉)	2/20					
	(O ₂ ,O ₃)	2/20					
	(O ₁)	1/20					
второй	(H ₅ ,H ₆)	2/20	3,221889	64,43778	1,100039	0,7454749	0,6937941
	(H ₇ ,H ₇ [′])	2/20					
	(H ₁ ,H ₂ ,H ₃ , H ₄)	4/20					
	(C ₅ , C ₆)	2/20					
	(C ₁ , C ₄)	2/20					
	(C ₂ ,C ₃)	2/20					
	(C ₈ ,C ₉)	2/20					
	(C ₇)	1/20					
	(O ₁)	1/20					
	(O ₂ ,O ₃)	2/20					

Важно отметить, что по мере увеличения порядка окрестности разбиение возрастает. Так, например, разбиение на окрестности первого порядка сохраняет эквивалентность H₁,H₂,H₃,H₄,H₅,H₆,H₇,H₇[′], но приводит к отнесению C₅,C₆ ; C₇; C₈,C₉ в иные классы эквивалентности.

Нами показана возможность применения метода симметрии окрестности при топологическом исследовании молекулы ангидрида БГДК и впервые рассчитаны топологические индексы информационного содержания графа относи-

тельно окрестности k -го порядка (IC_k), полного информационного содержания (TIC_k), структурного информационного содержания (SIC_k), информационного содержания связывания (BIC_k) и комплементарного информационного содержания (CIC_k) молекулы ангидрида БГДК.

Исходя из известных в литературе фактов, подтверждающих возможность корреляции индексов симметрии с физико – химическими свойствами некоторых соединений [2,4,5] можно допустить, что существует корреляция между индексами симметрии и физико – химическими свойствами для соединений норборненового ряда.

ЛИТЕРАТУРА

1. Рувре Д. Химические приложения топологии и теории графов / Под.ред.Кинга Р. М.: Мир,1987.С.259.
2. Магнусон В., Харрис Д., Бейсак С. Химические приложения топологии и теории графов / Под.ред. Кинга Р.М.:Мир,1987.С.206.
3. Станкевич М.И., Станкевич И.В., Зефиоров Н.С. // Успехи химии.1988. Т.57. №3. С.337.
4. Курбатова С.В., Финкельштейн Е.Е., Колосова Е.А. и др. // Журн.структ. химии. 2004. Т.45. №1.С.150.
5. Урядов В.Г., Аристова Н.В., Офицеров Е.Н. // Химия и компьютерное моделирование. Бутлеровские Сообщения.2002. №11.7.С.7.
6. Попова О.В. // Информатика. Красноярский ин-т экономики Санкт-Петербургской акад. упр. и экономики.2007.С.186.
7. Шеннон К. Работы по теории информации и кибернетике. / М.:Изд. ин. лит, 1963. С. 243
8. Мусаева Н.Ф., Салахов М.С., Салахова Р.С. и др. // Реакц.способн.соед. 1979. Т.16. Вып.3. С.398.
9. Мусаева Н.Ф.,Салахов М.С., Мамедова О.М. и др. // ДАН Азерб.ССР. 1980.№6.С.47.
10. Салахов М.С., Мусаева Н.Ф., Пулатова Ш.М. и др. Сумгаит,1982.8с.Деп. в ВИНТИ 02.02.1983. №770-83.
11. Салахов М.С., Багманова М.И. // ЖОрХ.2002..Т.38. Вып.2.С.265.
12. Багманова М.И., Багманов Б.Т., Умаева В.С. // Тезисы докл.конф. «Тонкий органический синтез и катализ» // Баку.1999.С.47

BITSIKLO [2.2.1]-HEPT-5-EN-2,3-DİKARBON TURŞUSU ANHİDRİDİ MOLEKULUNUN ƏHATƏ SİMMETRİYASININ TOPOLOJİ İNDEKSLƏRİNİN HESABLANMASI

M.S.SALANOV, A.M.MƏHƏRRƏMOV, B.T.BAĞMANOV, O.T.QREÇKİNA

XÜLASƏ

Bitsiklo [2.2.1]-hept-5-en-2,3-dikarbon turşusu anhidridi molekulu üçün ilk dəfə olaraq k -tərtibdən nisbi qrafının məlumat tərkibinin topoloji indeksləri (IC_k), tam məlumat tərkibi (TIC_k), əlaqələnmə məlumat tərkibi (BIC_k) və komplementar məlumat tərkibi (CIC_k) hesablanmışdır.

**CALCULATION OF TOPOLOGICAL INDICES OF SYMMETRY
OF ENVIRONMENT OF MOLECULE OF ANHYDRIDE
OF BICYCLO [2.2.1]-HEPT-5-ENE-2,3-DICARBOXYLIC ACID**

M.S.SALAKHOV, A.M.MAGERRAMOV, B.T.BAGMANOV, O.T.GRECHKINA

SUMMARY

The topological indices of information content of count relatively environment of order (IC_k), complete information content (TIC_k), structural information content (SIC_k), information content of binding (BIC_k) and complementary information content (CIC_k) for molecule of anhydride of bicyclo [2.2.1]-hept-5-ene-2,3-dicarboxylic acid have been firstly calculated.