

КОРРЕЛЯЦИОННЫЙ АНАЛИЗ В РЯДУ N-АЛКИЛКАРБОКСИИМИДОВ ХЛОР-ЭНДИКОВОЙ КИСЛОТЫ

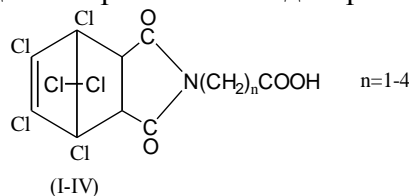
М.С.Салахов, О.Т.Гречкина, Б.Т.Багманов

Институт полимерных материалов Национальной АН Азербайджана

Описана взаимосвязь константы кислотной ионизации и температуры плавления со значениями топологических индексов Винера, Рандича и теоретико-информационных индексов, выявлена их предсказательная способность в ряду N-алкилкарбоксиимидов хлор-эндиковой кислоты.

В продолжение наших ранних исследований по установлению зависимости реакционной способности 5,5-диалкокситетрахлорциклопентадиенов и их физических свойств от теоретико-информационных индексов [1] в данной работе

приводятся результаты установления корреляционных зависимостей топологических индексов (ТИ) с некоторыми физико-химическими параметрами синтезированных нами [2] полихлорированных имидокарбоновых кислот (I-IV).



Конкретная цель данного исследования заключалась в установлении корреляции между теоретико-информационными индексами $IC_k, TIC_k, SIC_k, CIC_k$ ($k=0-2$), индексами Рандича $^{(1)}\chi$ и Винера W с одной стороны и pK_a и $T_{пл}$ для (I-IV) - с другой, изменяющимися в зависимости от наращивания метиленовых звеньев в алкилкарбоксылной группе имидного фрагмента соединений (I-IV).

Теоретико-информационные индексы информационного содержания графа относительно окрестности k -го порядка в расчете на одну вершину (IC_k), полного информационного содержания (TIC_k), структурного информационного содержания (SIC_k) и комплементарного информационного содержания (CIC_k) для соединений (1-4) рассчитаны по формулам (1-4) для $k=0-2$ [3]:

$$IC_k = - \sum_{i=1}^N p_i \log_2 p_i, \quad p_i = n_i/n \quad (1) \quad TIC_k = n_i C_k \quad (2) \quad SIC_k = IC_k / \log_2 n \quad (3) \quad CIC_k = \log_2 n - IC_k \quad (4)$$

Индекс Винера определяли как полусумму топологических расстояний между всеми N атомами в молекулярном графе и рассчитывали по формуле [4]:

$$W = \frac{1}{2} \sum_{i=1, j=1}^N d_{ij} \quad (5)$$

где d_{ij} - i -й j -й элемент матрицы расстояний, который показывает наикратчайшее расстояние между вершинами i и j в графе. Элементы матрицы вычислены по формулам: $d_{ii} = 1 - \frac{6}{z_i}$ (6)

$$d_{ij} = \sum b \frac{36}{z_i z_j} \quad (7)$$

где z_i и z_j - заряд ядра атомов i и j , соединенных данной связью, b - величина, характеризующая порядок связи. Индекс связности Рандича, вычисляли по формуле [3]:

$$^{(1)}\chi = \sum (\delta_i \cdot \delta_j)^{\frac{1}{2}} \quad (8)$$

где δ_i и δ_j - степени вершин молекулярного графа. Они соответствуют связям, соединяющим атомы i и j и отображают состав графа. Суммирование проводится по всем ребрам графа.

Таблица 1. Теоретико-информационные индексы $IC_k, TIC_k, SIC_k, CIC_k$ ($k=0-2$), $^{(1)}\chi$, W , $T_{пл}$ ($^{\circ}C$), pK_{α} соединений (I-IV)

№	n	IC_0	TIC_0	SIC_0	CIC_0	IC_1	TIC_1	SIC_1	CIC_1	IC_2	TIC_2	SIC_2	CIC_2	$^{(1)}\chi$	W	pK_{α}	$T_{пл}$
I	1	2.044	55.196	2.711	0.429	3.171	92.069	1.346	0.717	3.85	103.95	0.905	0.809	8.491	508.793	5.8	302
II	2	2.031	60.942	2.889	0.413	2.959	88.792	1.961	0.601	4.115	124.35	0.776	0.842	8.991	616.099	7.10	198
III	3	2.007	66.254	3.086	0.398	3.399	112.189	1.644	0.674	4.197	138.501	0.847	0.832	9.491	701.191	7.84	160
IV	4	1.979	71.27	3.189	0.383	3.341	120.29	1.828	0.646	4.201	151.236	0.968	0.813	9.991	790.873	(8,514)	(96)

Выявлено, что для этих соединений существуют достаточно хорошие линейные корреляции $f(pK_{\alpha})-TIC_2$, $f(pK_{\alpha})-W$, $f(pK_{\alpha})-^{(1)}\chi$, $f(T_{пл})-TIC_2$, $f(T_{пл})-W$ и $f(T_{пл})-^{(1)}\chi$ (рис.1-6).

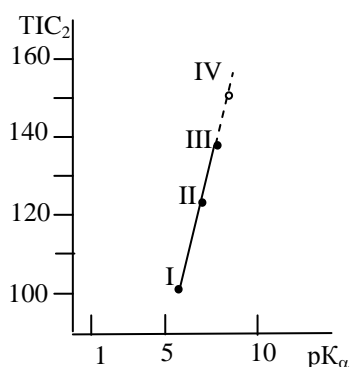


Рис.1 Зависимость ТИ TIC_2 от pK_{α} для соединений (I-IV)

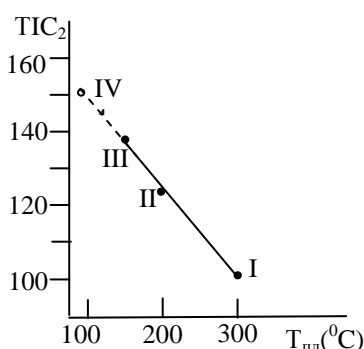


Рис.2 Зависимость ТИ TIC_2 от $T_{пл}$ для соединений (I-IV)

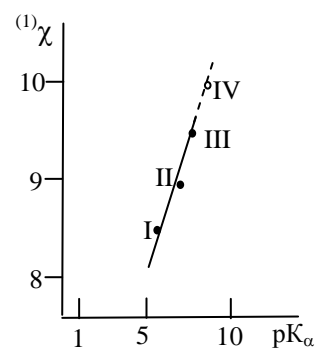


Рис.3 Зависимость ТИ $^{(1)}\chi$ от pK_{α} для соединений (I-IV)

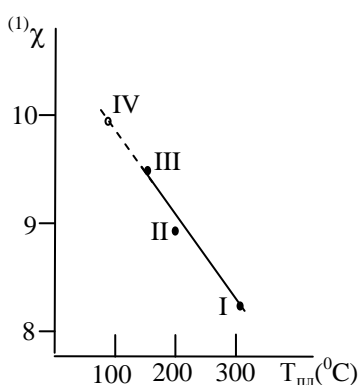


Рис.4 Зависимость ТИ $^{(1)}\chi$ от $T_{пл}$ для соединений (I-IV)

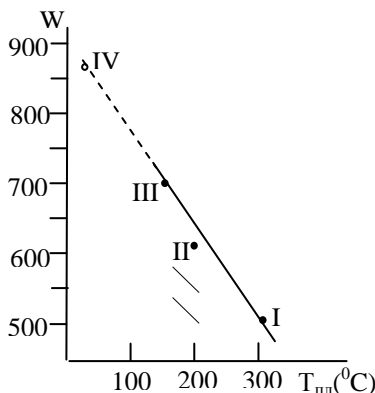


Рис.5 Зависимость ТИ W от pK_{α} для соединений (I-IV)

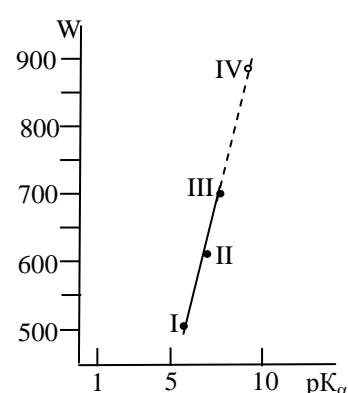


Рис.6 Зависимость ТИ W от pK_{α} для соединений (I-IV)

По методу наименьших квадратов [5] найдены параметры корреляционной зависимости $y = a \cdot x + b$ между pK_α , $T_{пл}$ и ТИ TIC_2 , W и ${}^{(1)}\chi$ для соединений (I-IV).

Таблица 2. Параметры корреляционной зависимости $y = a \cdot x + b$ между pK_α и $T_{пл}$ и топологическими индексами TIC_2 , ${}^{(1)}\chi$ и W для соединений (I-IV).

y	x	a	b
pK_α	TIC_2	0.0551	0.1805
pK_α	W	0.0107	0.4309
pK_α	${}^{(1)}\chi$	2.0420	-11.4463
$T_{пл}$	TIC_2	-4.1795	730.9813
$T_{пл}$	W	-0.7479	675.2425
$T_{пл}$	${}^{(1)}\chi$	-142.0113	1496.8241

Таким образом, выявлено, что в ряду полихлорированных имидакарбоновых кислот (I-IV), имеющих одинаковый цикл и различающихся только количеством метиленовых звеньев в алкилкарбоксовой группе имидного фрагмента ($n=1-4$), индексы TIC_2 , W и ${}^{(1)}\chi$ хорошо коррелируют

Коэффициенты корреляционных уравнений представлены в таблице 2. Используя корреляционные уравнения (табл.2) нами найдены предполагаемые значения pK_α и $T_{пл}$ для соединения (IV). (табл.3)

Таблица 3. Предполагаемые значения pK_α и $T_{пл}(^{\circ}C)$ для (IV)

ТИ	pK_α	$T_{пл}(^{\circ}C)$
TIC_2	8.514	96
W	8.893	83
${}^{(1)}\chi$	8.995	78

с pK_α и $T_{пл}$ этих соединений. Как видно из рис.(1-6), линейные зависимости $f(T_{пл}) - TIC_2$ и $f(pK_\alpha) - TIC_2$ носят более строгий характер, чем корреляции $f(T_{пл}) - W$, $f(T_{пл}) - {}^{(1)}\chi$, $f(pK_\alpha) - W$ и $f(pK_\alpha) - {}^{(1)}\chi$.

ЛИТЕРАТУРА

1. Салахов М.С., Багманов Б.Т, Гречкина О.Т., Умаева В.С.// Химич. проблемы. 2008. №2. С.289.
2. Салахов М.С., Каткова И.В., Умаева В.С., Тейвус Э.М., //Азерб.хим.журн. 1980. №2. С.63.
3. Рувре Д. Химические приложения топологии и теории графов. / Под редакцией Кинга Р. М. :Мир.1987. 259с.
4. Gutman I., Estrada E. // J.Chem. Inf.Comput.Sci. 1996. v. 36. P.541.
5. Шор Б.Статистические методы анализа и контроля качества и надежности. М.:Госэнергоиздат. 1966. 552с.

XLOR-ENDİK TURŞUSU N-ALKİL KARBOKSİİMLƏRİ SIRASINDA KORRELƏSİYƏ ANALİZİ

M.S.Salahov, O.T.Qreçkina, B.T.Bağmanov

Məqələdə xlorendik turşusu N-alkilkarboksiiidlərinin turşu ionlaşma sabitləri və ərimə temperaturuları ilə Viner, Randiç və nəzəri-məlumat əsaslı topooloji indekslər arasında qarşılıqlı əlaqə açılmış, bu indekslərin qabaqcadan təyin etmə imkanları göstərilmişdir.

***CORRELATION ANALYSIS IN A SERIES OF N-ALKYLCARBOXYIMIDES
OF CHLOROENDIC ACID***

M.S.Salakhov, O.T.Grechkina, B.T.Bagmanov

An interrelation of acidic ionization constants and melting temperature with values of Winer, Randich topological indices and theoretical-information indices has been described; their predicted capacity in a series of N-alkylcarboxyimides of chloroendic acid established.