

## Интегральные характеристики оптических спектров, как новый класс дескрипторов для сложных молекулярных систем

© Доломатов<sup>1,2\*</sup> Михаил Юрьевич, Ковалева<sup>2</sup> Элла Александровна,  
Латыпов<sup>1</sup> Камил Фаридович, Доломатова<sup>1,2+</sup> Милана Михайловна,

Ярмухаметова<sup>2</sup> Гульнара Ульфатовна и Паймурзина<sup>1,2</sup> Наталья Халитовна

<sup>1</sup> Башкирский государственный университет. Физико-технический институт. ул. Заки Валиди, 32.  
г. Уфа, 450076. Республика Башкортостан. Россия. Тел.: (917) 453-85-16. E-mail: [milana.1992@mail.ru](mailto:milana.1992@mail.ru)

<sup>2</sup> Уфимский государственный нефтяной технический университет. ул. Космонавтов 1. г. Уфа, 450062.  
Республика Башкортостан. Россия.

\*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

**Ключевые слова:** дескрипторы, структура-свойства, спектр-свойства, электронная структура, молекулы, молекулярные системы, биологические жидкости, углеводородные смеси.

### Аннотация

Авторами обобщены результаты по изучению взаимосвязи физико-химических свойств со спектральными интегральными характеристиками сложных молекулярных систем: интегральными коэффициентами поглощения, отражения, интегральными силами осцилляторов, цветовыми характеристиками, интегральными автокорреляционными функциями, свертки сигнала, определенными в видимой или УФ-областях спектра.

Показано, что эти интегральные характеристики являются числовыми параметрами адекватно передающими физико-химические и электронные свойства молекул и их смесей, поэтому эти величины можно использовать в качестве дескрипторов. Поскольку электронные спектры являются уникальными характеристиками вещества, эти дескрипторы обладают высокой дискриминирующей способностью. Дана классификация таких дескрипторов. Эти величины отличаются от таких физико-химических дескрипторов, как максимумы поглощения, так как для их определения требуется информация о спектре этих систем без выделения отдельных полос и максимумов с помощью Фурье-преобразования. В отличие от обычных физико-химических и квантово-механических дескрипторов предлагаемые дескрипторы могут быть применены к исследованию многокомпонентных систем с неизвестной структурой и составом. Это дает возможность применять эти величины для определения физико-химических свойств и усредненных по составу электронных характеристик вещества, таких как нефтяные дистилляты, нефти, биологические жидкости и тому подобные смеси. В работе приведены соответствующие примеры, подтвержденные статистической обработкой данных. Полученные закономерности целесообразно определить как закономерности «спектр-свойство» по аналогии с закономерностями «структура-свойство», известными в органической химии и химической информатике. Показана непротиворечивость развиваемого подхода, приводится квантово-химическая интерпретация этих закономерностей. На основе установленных зависимостей «спектр-свойство» могут быть разработаны аналитические методики определения количества сложных углеводородных систем, таких как нефти и продукты их переработки, газоконденсаты, продукты высокотемпературного пиролиза органических веществ и так далее. Установленные закономерности могут быть применены для определения потенциалов ионизации и сродства к электрону молекул, а также в медицинской диагностике, нефтепереработке, нефтехимии, технологии разработки нефтяных месторождений и в других областях науки и нанотехнологиях.