

Прогноз физико-химических свойств полициклических углеводов по электронным характеристикам молекул

© Доломатов^{1,2*} Михаил Юрьевич, Паймурзина² Наталья Халитовна
и Ковалева²⁺ Элла Александровна

¹ Физико-технический институт. Башкирский государственный университет.
ул. Заки Валиди, 32. г. Уфа, 450076. Республика Башкортостан. Россия.

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

E-mail: mdolomatov@bk.ru, raimurzina@inbox.ru, kovaleva-ugntu@yandex.ru

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: полициклические ароматические углеводороды, QSPR, интегральные спектроскопические дескрипторы, потенциал ионизации, сродство к электрону, температура кипения, давление насыщенного пара.

Аннотация

Для прогнозирования физико-химических свойств полициклических ароматических углеводов (ПАУ) разработаны QSPR модели на основе квантово-химических и интегральных спектроскопических дескрипторов. В качестве квантово-химических дескрипторов были использованы первые потенциалы ионизации рассчитанные по энергиям высших занятых молекулярных орбиталей, относительные автокорреляционные эмпирические параметры и общее число электронов неионизированных молекул. В качестве физико-химических свойств изучены потенциалы ионизации, сродства к электрону, температуры кипения, молярные массы, давление насыщенного пара ПАУ. Потенциалы ионизации и сродства к электрону вычислены методом функционала плотности DFT. Относительные эмпирические автокорреляционные параметры μ рассчитывались по спектрам молекул ПАУ, полученным экспериментально, и взятым из баз данных. Предсказательная сила регрессионных моделей проверена путем их тестирования на данных, которые не использовались во время генерации моделей. Коэффициенты детерминации для всех рассматриваемых в данной работе зависимостей не менее 0.95. Для оценки достоверности коэффициентов детерминации были вычислены их средние ошибки. В работе проведено сравнение теоретических (экспериментальных) и вычисленных по моделям значений. Оценка средних относительных погрешностей составила для электронодонорной способности, а именно для потенциалов ионизации 1.11%, для сродства к электрону 0.86%, для температуры кипения – 3.09%, по молярной массе не превышает 0.51%, по давлению насыщенного пара ошибка более значительна, что, по-видимому, связано с трудностями определения этой величины. Полученные модели позволяют проводить оценки физико-химических свойств с достаточной для практических приложений точностью. Результаты исследований могут быть практически использованы в нефтехимии, углехимии, органической химии, для прогноза физико-химических свойств молекул.