

Взаимосвязь топологических и физико-химических параметров ароматических гетероциклов

© Чекулаев Михаил Владимирович, Колосова Елена Александровна,
Курбатова*⁺ Светлана Викторовна

Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева.
ул. Акад. Павлова, 1. г. Самара, 443011. Россия. Факс: +7 (846) 334-54-17. E-mail: curbatsv@gmail.com

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: топология, топологические индексы, индексы связанности, вырождение топологических индексов, гетероатомы, производные 1,2,4-триазола, 1,2,4-оксадиазола, хинолина.

Аннотация

Приведены результаты сравнительного исследования особенностей топологии производных 1,2,4-триазола и 1,2,4-оксадиазола, а также хинолина. Для установления взаимосвязи между строением и свойствами этих соединений в качестве дескрипторов молекулярной структуры выбраны топологические индексы – индексы связанности пяти порядков, которые, как известно, коррелируют с различными физико-химическими характеристиками и свойствами молекул, что позволяет использовать их для идентификации и прогностических целей.

Установлено, что для исследованных соединений значения топологических индексов изменяются в сравнительно широких пределах. При этом увеличение числа атомов в молекуле, как правило, сопровождается ростом значений индексов, а возрастание порядка индекса связанности приводит к уменьшению их значений, что согласуется в целом с литературными данными.

Показано, что определенную сложность вызывает расчет топологических индексов молекул, содержащих гетероатомы, обусловленную существованием внутри- и межмолекулярных взаимодействий гетероатомов, которые не всегда могут быть учтены при расчете топологических индексов. Наличие таких связываний приводит к определенным особенностям построения молекулярных графов для таких соединений, при этом основной проблемой большинства топологических индексов, определяемых для гетероциклических систем, является их вырождение.

Анализ данных литературы показал, что для описания топологии молекул с гетероатомами предложены различные варианты расчета топологических индексов, в частности, индекс валентной связанности, хорошо коррелирующий со многими физико-химическими параметрами молекул. В работе при расчете топологических индексов был использован метод, предложенный М. Барришем и Н. Тринайстичем с соавторами, в соответствии с которым диагональные элементы матрицы расстояний для вершинно-реберно-взвешенных графов рассчитываются с учетом числа всех электронов (валентных и электронов внутренних оболочек) атомов

Выяснено, что максимальные значения коэффициента регрессии соответствуют корреляциям между поляризуемостью, площадью поверхности, объемом молекул исследованных гетероциклов и индексов индексов связанности (ИС) практически всех порядков. Повышение порядка ИС приводит к некоторому снижению значений корреляционного коэффициента преимущественно для производных оксадиазола, в то время как для производных триазола и хинолина уровень корреляций остается вполне высоким.

Выходные данные для цитирования русскоязычной версии статьи:

Чекулаев М.В., Колосова Е.А., Курбатова С.В. Взаимосвязь топологических и физико-химических параметров ароматических гетероциклов. *Бутлеровские сообщения*. 2022. Т.69. №3. С.21-31.
DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/22-69-3-21.

или

Mikhail V. Chekulaev, Elena A. Kolosova, Svetlana V. Kurbatova. Relationships between topological and physicochemical parameters of aromatic heterocycles. *Butlerov Communications*. 2022. Vol.69. No.3. P.21-31. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/22-3-21. (Russian)