

Электронная феноменологическая спектроскопия в исследовании полициклических углеводородов

© Ковалева Элла Александровна

Уфимский государственный нефтяной технический университет. ул. Космонавтов, 1.
г. Уфа, 450064. Россия. Тел.: +7 (917) 406-27-06. E-mail: kovaleva-ugntu@yandex.ru

Ключевые слова: электронная феноменологическая спектроскопия, квантовый континуум, принцип «структура-свойство», принцип «спектр-свойство», интегральные дескрипторы, потенциал ионизации, сродство к электрону, автокорреляционный анализ, полициклические ароматические углеводороды.

Аннотация

В работе представлен системный анализ электронной феноменологической спектроскопии (ЭФС) на примере исследования полициклических ароматических углеводородов (ПАУ). Показано, что ЭФС, в отличие от классической оптической спектроскопии, оперирует широкополосными интегральными спектральными характеристиками сложных систем и молекул как целостных объектов и рассматривает спектр как квантовый континуум, что позволило установить эффекты типа «спектр – свойство» и «цвет – свойство» без детального моделирования электронной и молекулярной структуры. Сформулированы и обоснованы три ключевых принципа ЭФС: интегральность (использование обобщённых широкополосных сигнальных параметров – интегральных сил осциллятора, автокорреляционных функций, цветовых характеристик); феноменологичность (установление эффектов между спектральными и физико-химическими параметрами без детального описания структуры и состава компонентов системы); масштабируемость (применимость методов к объектам различной сложности – от атомов и молекул до многокомпонентных смесей с хаосом химического состава). На примере ПАУ продемонстрирована поэтапная схема анализа. Экспериментально обоснована эффективность ряда интегральных параметров: интегральной силы осцилляторов – для оценки квантового континуума распределения спектральной плотности; логарифмического молярного интегрального показателя поглощения – для экспресс-расчёта потенциалов ионизации и сродства к электрону; интегрального параметра автокорреляционной функции – для характеристики корреляционного взаимодействия электронных состояний; цветовых координат (RGB, XYZ) – как дескрипторов электронных свойств. Приведены соответствующие зависимости для расчёта энергетических характеристик молекул через спектроскопические параметры. Показано, что ЭФС эффективно выявляет структурные особенности ПАУ, коррелирующие с канцерогенной активностью. Результаты подтверждают, что ЭФС является эффективным инструментом для: выявления скрытых закономерностей в сложных органических системах; прогнозирования физико-химических свойств ПАУ; разработки методов экспресс-анализа в органической электронике, материаловедении и нефтехимии.

Выходные данные для цитирования русскоязычной печатной версии статьи:

Ковалева Э.А. Электронная феноменологическая спектроскопия в исследовании полициклических углеводородов. *Бутлеровские сообщения*. 2026. Т.85. №2. С.17-36. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/26-85-2-17

Выходные данные для цитирования русскоязычной электронной версии статьи:

Ковалева Э.А. Электронная феноменологическая спектроскопия в исследовании полициклических углеводородов. *Бутлеровские сообщения В*. 2026. Т.12. №1. Id.3. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/26-85-2-17/ROI-jbc-RB/26-12-1-3

The output for citing the English online version of the article:

Ella A. Kovaleva. Electronic phenomenological spectroscopy in the study of polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs). *Butlerov Communications В*. 2026. Vol.12. No.1. Id.3. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/26-85-2-17/ROI-jbc-B/26-12-1-3

Литература

- [1] Долوماتов М.Ю. Физико-химические основы новых методов исследования сложных многокомпонентных систем. Перспективы практического использования. *Москва: ЦНИТЭНефтехим. 1991. 72с.* [M.Yu. Dolomatov, Physicochemical foundations of new methods for studying complex multicomponent systems. Prospects for practical use. *Moscow: CNITENeftekhim. 1991. 72p.* (Russian)]
- [2] Долوماتов М.Ю. Применение электронной спектроскопии в физико-химии многокомпонентных стохастических смесей и сложных молекулярных систем. *Уфа: ЦНТИ. 1989. 47с.* [M.Yu. Dolomatov. Application of electron spectroscopy in the physicochemistry of multicomponent stochastic mixtures and complex molecular systems. *Ufa: CNTI. 1989. 47p.* (Russian)]
- [3] Долوماتов М.Ю. Некоторые физико-химические аспекты прогнозирования свойств многокомпонентных систем в условиях экстремальных воздействий. *Журнал всеобщего химического общества им. Д.И. Менделеева. 1991. Т.36. №5. С.632-639.* [M.Yu. Dolomatov. Some physicochemical aspects of predicting the properties of multicomponent systems under extreme conditions. *ChemChemTech. 1991. Vol.36. No.5. P.632-639.* (Russian)]
- [4] M.Yu. Dolomatov, N.A. Zhuravleva. Thermodynamic models of the distribution of liferelated organic molecules in the interstellar medium. *Astrophysics and Space Science. 2014. Vol.351. No.5. P.213-218. DOI: 10.1007/s10509-014-1844-8*
- [5] Долوماتов М.Ю. Фрагменты теории реального вещества как систем с химическим хаосом: (от углеводородных веществ к галактикам). Издание 2-е переработанное и дополненное. *Москва: ООО «Издательский дом Недра». 2025. 360 с. ISBN 978-5-8365-0533-2.* [M.Yu. Dolomatov. Fragments of the theory of real matter as systems with chemical chaos: (from hydrocarbon substances to galaxies). 2nd ed., rev. and augm. *Moscow: Nedra Publishers LLC. 2025. 360p. ISBN 978-5-8365-0533-2.* (Russian)]
- [6] Калашченко Н.В., Долوماتов М.Ю., Дезорцев С. В. Электронная феноменологическая спектроскопия крови человека в норме и патологии : теоретические и практические аспекты. *Москва: Интер. 2010. 255с. ISBN 978-5-98761-034-3* [N.V. Kalashchenko, M.Yu. Dolomatov, S.V. Dezortsev. Electron phenomenological spectroscopy of human blood in health and disease: theoretical and practical aspects. *Moscow: Inter. 2010. 255p. ISBN 978-5-98761-034-3.* (Russian)]
- [7] Абросимов А.А. Экология переработки углеводородных систем: Учебник под ред. Долوماتова М.Ю. и Теляшева Э.Г. *Москва: Химия. 2002. 608с. ISBN 5-7245-1198-3* [A.A. Abrosimov. Ecology of hydrocarbon system processing: textbook. Ed. by M.Yu. Dolomatov, E.G. Telyashev. *Moscow: Khimiya. 2002. 608p.* (Russian)]
- [8] Долوماتов М.Ю., Бахтизин Р.З., Шарипов Т.И. Физические основы наноэлектроники : учебник для вузов. *Москва: Издательство Юрайт. 2026. 173с. ISBN 978-5-534-14924-1.* [M.Yu. Dolomatov, R.Z. Bakhtizin, T.I. Sharipov. Physical foundations of nanoelectronics: textbook for universities. *Moscow: Yurayt Publishing House. 2026. 173p.* (Russian)]
- [9] M.Yu. Dolomatov, G.R. Mukaeva, D.O. Shulyakovskaya. Electron phenomenological spectroscopy and application in investigating complex substances in chemistry, nanotechnology and medicine. *Journal of Materials Science and Engineering B. 2013. Vol.3. No.3. P.183-199. DOI:10.17265/2161-6221/2013.03.008.*
- [10] Ельяшевич М.А. Общие вопросы спектроскопии. Атомная и молекулярная спектроскопия. Книга 1. *Москва: Либроком. 2024. 240с. ISBN 978-5-397-07280-9.* [M.A. Elyashevich. General questions of spectroscopy. Atomic and molecular spectroscopy. Book 1. *Moscow: Librokom. 2024. 240p. ISBN 978 5 397 07280 9.* (Russian)]
- [11] W.W. Parson, C. Burda. Modern optical spectroscopy: From fundamentals to applications in chemistry, biochemistry and biophysics. 3rd ed. *Cham: Springer Nature. 2023. 650p.*
- [12] V. Fauser, J. Tolksdorf, E. Zeidler. Quantum gravity: Mathematical models and experimental bounds. *Basel; Boston: Birkhäuser Verlag. 2007. 327p. ISBN 3-7643-7764-4.*
- [13] Клар Э. Полициклические углеводороды. В двух томах. Перевод с английского Ершова В.В., Горелика М.В. *Москва: Издательство «Химия». 1971. 442с., 456с.* [E. Clar. Polycyclic Hydrocarbons. In 2 vols. Translated from English by V.V. Ershov, M.V. Gorelik. *Moscow: Khimiya. 1971. Vol.1: 442p.; Vol.2: 456p.* (Russian)]
- [14] Фундаментальные аспекты химии нефти. Природа смол и асфальтенов. Ф.Г. Унгер, Л.Н. Андреева. *Институт химии нефти Сибирского отделения РАН. Новосибирск: Наука. Сибирская издательская фирма РАН. 1995. 192с. ISBN 5-02-030605-3* [F.G. Unger, L.N. Andreeva. Fundamental aspects of petroleum chemistry. Nature of resins and asphaltene. *Siberian Federal Scientific Center of Chemistry and Applied Chemistry of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences. Novosibirsk: Nauka. Siberian Publishing House of the Russian Academy of Sciences. 1995. 192p. ISBN 5-02-030605-3* (Russian)]

- L.N. Andreeva. Fundamental aspects of petroleum chemistry. Nature of resins and asphaltenes. Institute of petroleum chemistry of the Siberian branch of the RAS. *Novosibirsk: Nauka. Sibirsk Publishing Firm RAN. 1995.* 192 p. (Russian)]
- [15] Бурдельная Н.С., Борисова Л.С., Бушнев Д.А., Ильченко А.А. Значение молекулярной и надмолекулярной структуры асфальтенов для геохимических исследований (обзор). *Петролеомика. Petroleomics. 2023.* Т.3. №1. С.35-56. DOI: 10.53392/27823857-2023-3-1-35 [N.S. Burdel'naya, et al. Geochemical Significance of the Molecular and Supramolecular Structures of Asphaltenes (A Review). N.S. Burdel'naya, L.S. Borisova, D.A. Bushnev, A.A. Ilchenko. *Petroleum Chemistry. 2023.* Vol.63. No.1. P.31-51. DOI: 10.1134/s0965544123020172]
- [16] Доломатов М.Ю. Электронная феноменологическая спектроскопия и её применение в исследовании сложных молекулярных систем в технологии, химии, физике и медицине: монография. Под науч. ред. Доломатова М.Ю. *Казань: Инновационно-издательский дом «Бутлеровское наследие». 2024.* 308с. (Бутлеровское наследие; кн. 6). ISBN 978-5-6047662-4-8. [M.Yu. Dolomatov. Electron phenomenological spectroscopy and its application in the study of complex molecular systems in technology, chemistry, physics and medicine: monograph. Ed. by M.Yu. Dolomatov. *Kazan: Publishing House Ltd. «Innovation and Publishing House «Butlerov Heritage». 2024.* 308p. (Butlerov Heritage; Book 6). ISBN 978-5-6047662-4-8. (Russian)]
- [17] Доломатов М.Ю., Шуляковская Д.О., Ярмухаметова Г.У., Мукаева Г.Р. Оценка физико-химических свойств углеводородных систем по корреляциям спектр-свойства и цвет-свойства. *Химия и технология топлив и масел. 2013.* №3. С.52-56. ISSN 0023-1169. [M.Yu. Dolomatov, D.O. Shulyakovskaya, G.U. Yarmukhametova, G.R. Mukaeva. Assessment of physicochemical properties of hydrocarbon systems using spectrum-property and color-property correlations. *Chemistry and Technology of Fuels and Oils. 2013.* No.3. P.52-56. (Russian)]
- [18] Доломатов М.Ю., Карташева В.В. Определение свойств нефтей и нефтепродуктов по корреляциям цвет-свойство и спектр-свойство. *Химическая технология. 2004.* Т.5. №2. С.12-14. ISSN: 1684-5811 [M.Yu. Dolomatov, V.V. Kartasheva. Determination of properties of crude oils and petroleum products using color-property and spectrum-property correlations. *Chemical Technology. 2004.* Vol.5. No.2. P.12-14. (Russian)]
- [19] Доломатов М.Ю., Ковалева Э.А., Латыпов К.Ф. Электронная феноменологическая спектроскопия и ее применение в исследовании сложных веществ в технологии, химии, нанофизике и медицине: монография. Министерство науки и высшего образования РФ. Башкирский государственный университет. *Уфа: РИЦ БашГУ. 2019.* Ч.1: Электронная феноменологическая спектроскопия в исследовании свойств и структуры молекул и наночастиц. 2019. 321с. ISBN 978-5-7477-4596-4 [M.Yu. Dolomatov, E.A. Kovaleva, K.F. Latypov, Electron phenomenological spectroscopy and its application in the study of complex substances in technology, chemistry, nanophysics and medicine: monograph. Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation, Bashkir State University. *Ufa: RITs BashGU. 2019.* Part 1: Electron phenomenological spectroscopy in the study of properties and structure of molecules and nanoparticles. 321p. (Russian)]
- [20] Доломатов М.Ю., Ковалева Э.А., Латыпов К.Ф., Доломатова М.М., Ярмухаметова Г.У., Паймурзина Н.Х. Интегральные характеристики оптических спектров, как новый класс дескрипторов для сложных молекулярных систем. *Бутлеровские сообщения. 2019.* Т.57. №1. С.1-14. <https://doi.org/10.37952/ROI-jbc-01/19-57-1-1> [M.Yu. Dolomatov, E.A. Kovaleva, K.F. Latypov, M.M. Dolomatova, G.U. Yarmukhametova, N.Kh. Paymurzina. Integral characteristics of optical spectra, as a new class of descriptors for complex molecular systems. *Butlerov Communications. 2019.* Vol.57. No.1. P.1-14. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/19-57-1-1. (Russian)]
- [21] Ковалева Э.А., Валиуллин А.Р. Расчет интегральных сил осцилляторов и максимумов длин волн по электронным спектрам поглощения органических соединений в разработанной программе на языке программирования Python 2.7. *Вестник молодого ученого УГНТУ. 2016.* Т.5. №1. С.38-40. [E.A. Kovaleva, A.R. Valiullin. Calculation of integral oscillator forces and wavelength maximums based on electronic absorption spectra of organic compounds using a program developed in Python 2.7. *Bulletin of the Young Scientist of UGNTU. 2016.* Vol.5. No.1. P.38-40. (Russian)]
- [22] Доломатов М.Ю., Запорин В.П., Доломатова М.М., Паймурзина Н.Х., Ковалева Э.А., Бурангулов Д.З., Кузнецов И.Г. Разработка новых направлений оценки выхода и качества

- нефтяного углерода с применением электронной феноменологической спектроскопии. *Башкирский химический журнал*. **2023**. Т.30. №2. С.41-44. DOI: 10.17122/bcj 2023 2 41 44. [M.Yu. Dolomatov, V.P. Zaporin, M.M. Dolomatova, N.Kh. Paymurzina, E.A. Kovaleva, D.Z. Burangulov, I.G. Kuznetsov. Development of new directions for assessing the yield and quality of petroleum carbon using electronic phenomenological spectroscopy. *Bashkir Chemical Journal*. **2023**. Vol.30. No.2. P.41-44. DOI: 10.17122/bcj 2023 2 41 44. (Russian)]
- [23] Доломатов М.Ю. Фрагменты теории реального вещества. *Москва: Химия*. **2005**. 208с. ISBN 5-98109-018-9 [M. Yu. Dolomatov. The theory of real substance. *Moscow: Khimiya*. **2005**. 208p. ISBN 5-98109-018-9 (Russian)]
- [24] Доломатов М.Ю., Субханкулов В.Р., Доломатова М.М., Ковалева Э.А., Вершинин С.С., Белотелов О.А., Казаев И.В. Применение электронной феноменологической спектроскопии как экспресс метода исследования свойств сырья для получения многофункциональных углеродных материалов. *Химия и технология топлив и масел*. **2025**. Т.648. №2. С.36-40. DOI: 10.32935/00231169202564823640. [M.Yu. Dolomatov, V.R. Subkhankulov, M.M. Dolomatova, E.A. Kovaleva, S.S. Vershynin, O.A. Belotelov, I.V. Kazaev. Application of Electron Phenomenological Spectroscopy as Quickly Method of Properties Defeneten of Hydrocarbon Feedstock for Production of Carbon Materials. *Chemistry and Technology of Fuels and Oils*. **2025**. Vol.648. No.2. P.36-40. DOI: 10.32935/00231169202564823640. (Russian)]
- [25] Ковалева Э.А., Доломатов М.Ю. Автокорреляционный анализ спектров поглощения электромагнитного излучения молекулами полициклических соединений в петагерцевой области. *Электромагнитные волны и электронные системы*. **2016**. №9. С.20-24. [E.A. Kovaleva, M.Yu. Dolomatov. Autocorrelation analysis of absorption spectra of electromagnetic radiation by molecules of polycyclic compounds in petahertz region. *Electromagnetic waves and electronic systems*. **2016**. No.9. P.20-24. (Russian)]
- [26] Доломатов М.Ю., Паймурзина Н.Х., Ковалева Э.А. Полуэмпирическая оценка потенциалов ионизации молекул полициклических органических полупроводников. *Электротехнические и информационные комплексы и системы*. **2016**. Т.12. №3. С.100-107. [M.Yu. Dolomatov, N.Kh. Paymurzina, E.A. Kovaleva, Semi-empirical estimation of ionization potentials of polycyclic organic semiconductor molecules. *Electrical and data processing facilities and systems*. **2016**. Vol.12. No.3. P.100-107. (Russian)]
- [27] Синклер Р.С., Баттл Д.Р., Ригг Б. и др. Цвет в промышленности. Под ред. Родерика Мак-Дональда; Пер. с англ. В.В. Пеновой, П.П. Новосельцева; Под ред. Ф.Ю. Телегина. *Москва: Логос*. **2002**. XVI. 579с. ISBN 5-94010-175-5. [R.S. Sinkler, D.R. Battle, B. Rigg, et al. Colour in Industry ed. by Roderick McDonald; transl. from English by V.V. Penova, P.P. Novoseltsev; ed. by F.Yu. Telegin. *Moscow: Logos*. **2002**. XVI. 579p. ISBN 5-94010-175-5. (Russian)]
- [28] Шмидт В. Оптическая спектроскопия для химиков и биологов. *Москва: Техносфера*. **2007**. 363с. ISBN 978-5-94836-140-6 [V. Schmidt. Optical spectroscopy for chemists and biologists. *Moscow: Tekhnosfera*. **2007**. 363p. ISBN 978-5-94836-140-6 (Russian)]
- [29] Доломатов М.Ю. Общее цветоведение. Теория цвета и ее практическое применение. *Saarbruken: LAP LAMBERT*. **2011**. 330с. ISBN 978-3-8433-1934-8. [M.Yu. Dolomatov. General colour science. Theory of colour and its practical applications. *Saarbrücken: LAP LAMBERT*. **2011**. 330p. ISBN 978-3-8433-1934-8. (Russian)]
- [30] Доломатов М.Ю., Ярмухаметова Г.У., Шуляковская Д.О. Оценка первых потенциалов ионизации и сродства к электрону молекул полициклических органических полупроводников по цветовым характеристикам в колориметрических системах XYZ и RGB. *Прикладная физика*. **2011**. №1. С.16-27. [M.Yu. Dolomatov, G.U. Jarmuhametova, D.O. Shulyakovskaya. The estimation of the first ionization potentials and electron affinity of the molecules of polycyclic organic semiconductors applying the color characteristics in colorimetric systems XYZ and RGB. *Applied Physics*. **2011**. No.1. P.16-27. (Russian)]
- [31] Доломатов М.Ю. Карташева В.В. Определение свойств нефтей и нефтепродуктов по корреляциям цвет-свойство и спектр-свойство. *Химическая технология*. **2004**. Т.5. №2. С.12-14. [M.Yu. Dolomatov, V.V. Kartasheva Determination of properties of crude oils and petroleum products using colour-property and spectrum-property correlations. *Journal of Chemical Technology*. **2004**. Vol.5. No.2. P.12-14. (Russian)]
- [32] Шёнфлис А. Kristallsysteme und Kristallstruktur. *Leipzig: B. G. Teubner*. **1891**. 639p.

- [33] Hargittai Istvan Symmetry in Chemistry. *European Review, Cambridge University Press (CUP)*. **2005**. Vol.13. Supp. No.2. P.61-75.
- [34] Долوماتов М.Ю., Паймурзина Н.Х., Ковалева Э.А. Оценка донорно-акцепторных свойств молекул полициклических углеводородов по интегральным автокорреляционным характеристикам оптических спектров. *Бутлеровские сообщения*. **2018**. Т.53. №2. С.28-37. ROI: jbc-01/18-53-2-28 [M.Yu. Dolomatov, N.Kh. Paymurzina, E.A. Kovaleva. Evaluation of donor-acceptor properties of polycyclic hydrocarbon molecules by the integral autocorrelation characteristics of the optical spectra. *Butlerov Communications*. **2018**. Vol.53. No.2. P.28-37. ROI: jbc-01/18-53-2-28 (Russian)]
- [35] Паймурзина Н.Х., Ковалева Э.А., Долوماتов М.Ю. Закономерности структура-свойство для оценки молярной массы, температуры кипения и коэффициента распределения полициклических ароматических углеводородов. *Башкирский химический журнал*. **2020**. Т.27. №3. С.14-18. DOI: 10.17122/bcj-2020-3-14-18 [N.Kh. Paymurzina, E.A. Kovaleva, M.Yu. Dolomatov. Regression model for estimating molar mass, boiling point and octanol/water partition coefficient of polycyclic aromatic hydrocarbons. *Bashkir Chemical Journal*. **2020**. Vol.27. No.3. P.14-18. DOI: 10.17122/bcj-2020-3-14-18 (Russian)]
- [36] Долوماتов М.Ю., Ковалева Э.А., Паймурзина Н.Х., Валиуллин А.Р. Оценка электронодонорных свойств по автокорреляционным характеристикам функции распределения спектральной плотности электронных спектров поглощения. *Башкирский химический журнал*. **2016**. Т.23. №3. С.35-40. [M.Yu. Dolomatov, E.A. Kovaleva, N.Kh. Paimurzina, A.R. Valiullin. Evaluation of electron donor properties based on autocorrelation characteristics of the spectral density electronic absorption spectrums distribution function. *Bashkir Chemical Journal*. **2016**. Vol. 23. No.3. P.35-40. (Russian)]
- [37] Долوماتов М.Ю., Ярмухаметова Г.У., Доломатова М.М. Идентификация нефти по параметрам электронного абсорбционного спектра. *Журнал прикладной спектроскопии*. **2017**. Т.84. №1. С.132-137. [M.Yu. Dolomatov, G.U. Yarmuhametova, M.M. Dolomatova. Method of identification of oil by parameters of electronic absorption spectrum. *Journal of Applied Spectroscopy*. **2017**. Vol.84. No.1. P.132-137. (Russian)]
- [38] Долوماتов М.Ю. Теория систем с хаосом химического состава в природе и технологии. *Бутлеровские сообщения*. **2021**. Т.65. №3. С.108-118. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/21-65-3-108 [M.Yu. Dolomatov. Theory of systems with chaos of chemical composition in nature and technology. *Butlerov Communications*. **2021**. Vol.65. No.3. P.108-118. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/21-65-3-108. (Russian)]
- [39] Долوماتов М. Ю. Термодинамический анализ взаимосвязей спектр-свойства в сложных молекулярных и многокомпонентных системах. *Башкирский химический журнал*. **2010**. №3. С.76-80. [M.Yu. Dolomatov. Thermodynamic analysis of correlation spectrum properties for complex and multicomponent systems. *Bashkir Chemical Journal*. **2010**. No.3. P.76-80.
- [40] Долوماتов М.Ю., Леонов В.В. Взаимосвязь энергии активации вязкого течения ньютоновских углеводородных сред и интегральных характеристик их электронных спектров поглощения в видимой и УФ области. *Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки*. **2010**. Т.16. №4. С.141-149. [M.Yu. Dolomatov, V.V. Leonov. Relationship between activation energy of viscous flow of Newtonian hydrocarbon media and integral characteristics of their electronic absorption spectra in visible and UV regions. *University proceedings Volga region. Physical and mathematical sciences*. **2010**. Vol.16. No.4. P.141-149.]
- [41] Долوماتов М. Ю. Феноменологическая модель суперфункционала энергетических состояний и его приложение в электронике и термодинамике. *Электротехнические и информационные комплексы и системы*. **2015**. Т.11. №4. С.125-133. [M.Yu. Dolomatov. Phenomenological model of energy state superfunctional and its application for electronics and thermodynamics. *Electrical and Data Processing Facilities and Systems*. **2015**. Vol.11. No.4. P.125-133. (Russian)]
- [42] Долوماتов М.Ю., Паймурзина Н.Х. Специфические квантовые эффекты электронной корреляции в органических полупроводниках. *Электротехнические и информационные комплексы и системы*. **2013**. Т.9. №2. С.114-120. [M.Yu. Dolomatov, N.Kh. Paimurzina. Specific quantum effects of electronic correlation in organic semiconductors. *Electrical and Data Processing Facilities and Systems*. **2013**. Vol.9. No2. P.114-120. (Russian)]

- [43] L. Hackermueller, K. Hornberger, B. Brezger, A. Zeilinger, M. Arndt. Decoherence of matter waves by thermal emission of radiation. *Nature*. **2004**. Vol.427. No.6976. P.711-714. DOI:10.1038/nature02276.
- [44] Доломатов М.Ю., Паймурзина Н.Х., Ковалева Э.А. Патент РФ № 2658514. Способ определения сродства к электрону молекул полициклических ароматических углеводородов: № 2016141541: заявл. 21.10.2016: опубл. 21.06.2018. Бюл. 18. Патентообладатель Башкирский государственный университет. 6с. [M.Yu. Dolomatov, N.Kh. Paymurzina, E.A. Kovaleva. Method for determining electron affinity of polycyclic aromatic hydrocarbon molecules. *Patent RF* No.2658514. Filed 21.10.2016. Published 21.06.2018. Bul. No.18. Assignee: Bashkir State University. 6p. (Russian)]
- [45] Доломатов М.Ю., Паймурзина Н.Х., Ковалева Э.А. Способ определения потенциала ионизации полициклических ароматических углеводородов. Патент РФ №2621470. Дата регистрации 06.06.2017. Бюл. №16. 6с. [M.Yu. Dolomatov, N.Kh. Paymurzina, E.A. Kovaleva. Method of determining the potential of ionization of molecules of polycyclic aromatic hydrocarbons. *Patent RF* No. 2621470. Published 06.06.2017. Bul. No.16. Assignee: *Bashkir State University*. 6p. (Russian)]
- [46] Доломатов М.Ю., Шуляковская Д.О., Ярмухаметова Г.У., Мукаева Г.Р. Оценка физико-химических свойств углеводородных систем по корреляциям спектр-свойства и цвет-свойства. *Химия и технология топлив и масел*. **2013**. №3. С.52-56. ISSN0023-1169. [M.Y. Dolomatov, D.O. Shulyakovskaya, G.U. Yarmukhametova, G.R. Mukaeva. Evaluation of physico-chemical properties of hydrocarbon systems based on spectrum-property and color-property correlations. *Chemistry and Technology of Fuels and Oils*. **2013**. Vol.49. No.3. P.273-280. DOI: 10.1007/s10553-013-0441-9 (Russian)]
- [47] Паймурзина Н.Х., Ковалева Э.А., Доломатов М.Ю. Закономерности структура-свойство для оценки молярной массы, температуры кипения и коэффициента распределения полициклических ароматических углеводородов. *Башкирский химический журнал*. **2020**. Т.27. №3. С.14-18. DOI: 10.17122/bcj-2020-3-14-18 [N.Kh. Paymurzina, E.A. Kovaleva, M.Yu. Dolomatov. Regression model for estimating molar mass, boiling point and octanol/water partition coefficient of polycyclic aromatic hydrocarbons. *Bashkir Chemical Journal*. **2020**. Vol.27. No.3. P.14-18. DOI: 10.17122/bcj-2020-3-14-18. (Russian)]
- [48] Шаповал Е.В. Происхождение, содержание полициклических ароматических углеводородов в нефтепродуктах и оценка их воздействия на окружающую среду. *Дисс... канд. хим. наук. Краснодар*. **2014**. 120с. [E.V. Sharoval. Origin, content of polycyclic aromatic hydrocarbons in petroleum products and assessment of their environmental impact. *PhD Thesis in Chem. Sci. Krasnodar*. **2014**. 120p. (Russian)]
- [49] Паймурзина Н.Х., Ковалева Э.А., Доломатов М.Ю. Оценка канцерогенных свойств полициклических ароматических углеводородов по спектроскопическим и топологическим дескрипторам. *Бутлеровские сообщения*. **2022**. Т.69. №2. С.1-6. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/22-69-2-1. [N.Kh. Paymurzina, E.A. Kovaleva, M.Yu. Dolomatov. The evaluation of the carcinogenic properties of polycyclic aromatic carbohydrates according their spectroscopic and topological descriptors. *Butlerov Communications*. **2022**. Vol.69. No.2. P.1-6. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/22-69-2-1. (Russian)]
- [50] Баскин И.И., Маджидов Т.И., Варнек А.А. Введение в хемоинформатику. Моделирование "структура-свойство": учебное пособие. *Казанский федеральный ун-т. Казань: Изд-во Казанского ун-та*. **2015**. 302с. ISBN 978-5-00019-442-3. [I.I. Baskin, T.I. Madzhidov, A.A. Varnek. Introduction into Chemoinformatics. "Structure -Property" modeling. *Kazan: Kazan University Publishing House*. **2015**. 302p. ISBN: 978-5-00019-442-3 (Russian)]
- [51] Папулов Ю.Г. Молекулярные графы в химических исследованиях. *Тез. докл. межвуз. конф. 21-26 мая 1990 г. Калинин: КГУ*. **1990**. 116с. [Yu.G. Papulov. Molecular graphs in chemical research. Abstracts of the interuniversity conference. May 21-26. 1990. *Kalinin: Kalinin State University*. **1990**. 116p. (Russian)]
- [52] Зефиоров Н.С., Кучанов С.И. Применение теории графов в химии. *Новосибирск: Наука: Сиб. отделение*. **1988**. 304с. ISBN 5-02-029192-7. [N.S. Zefirov, S.I. Kuchanov. Application of graph theory in chemistry. *Novosibirsk: Nauka, Siberian Branch*. **1988**. 304p. ISBN 5-02-029192-7. (Russian)]
- [53] Кинг Р. Химические приложения топологии и теории графов. Ред. Р. Кинг; перевод с англ. М. Н. Глуховцева; под ред. [и с предисл.] Ю. А. Жданова. *Москва: Мир*. **1987**. 560с.

- [King, R. (ed.). Chemical applications of topology and graph theory. Translated from English by M. N. Glukhovtsev; ed. and foreword by Yu. A. Zhdanov. *Moscow: Mir*. **1987**. 560p. (Russian)]
- [54] Виноградова М.Г. Количественные корреляции "Структура – свойство" алканов: Аддитив. схемы расчета. Учеб. пособие М.Г. Виноградова, Ю.Г. Папулов, В.М. Смоляков. *Тверь: ТвГУ*. **1999**. 95с. ISBN 5-7609-0134-6. [M.G. Vinogradova, Yu.G. Papulov, V.M. Smolyakov. Quantitative structure property correlations of alkanes: Additive calculation schemes. *Tver: Tver State University*. **1999**. 95p. ISBN 5 7609 0134 6. (Russian)]
- [55] Раевский О.А. Дескрипторы молекулярной структуры в компьютерном дизайне биологически активных молекул. *Успехи химии*. **1999**. Т.68. №6. С.555-575. [O.A. Raevskiy. Molecular structure descriptors in computer aided design of bioactive molecules. *Russian Chemical Reviews*. **1999**. Vol.68. No.6. P.555-575. (Russian)]
- [56] Michelsen M.L. Calculation of phase envelopes and critical points for multicomponent mixtures. *Fluid Phase Equilib.* **1980**. No.4(1-2). P.1-10. [https://doi.org/10.1016/0378-3812\(80\)80001-X](https://doi.org/10.1016/0378-3812(80)80001-X)
- [57] A. Varnek, I.I. Baskin. Chemoinformatics as a theoretical chemistry discipline. *Molecular Informatics*. **2011**. Vol.30. No.1. P.20-32. DOI:10.1002/minf.201000100.
- [58] M. Tohru, H.C. Anthony, G.H. Charles. Predicting the hydroxymethylation rate of phenols with formaldehyde by molecular orbital calculation. *Journal of Wood Science*. **2002**. Vol.48. No.2. P.153-158. DOI:10.1007/BF00767293.
- [59] Ахметов С.А., Гайсина А.Р. Моделирование и инженерные расчеты физико-химических свойств углеводородных систем. *Санкт-Петербург: Издательство «Недра»*. **2010**. 128с. ISBN 978-5-94089-138-4. [S.A. Akhmetov, A.R. Gaisina. Modeling and engineering calculations of physicochemical properties of hydrocarbon systems. *Saint-Petersburg, Nedra Publishing House*. **2010**. 128p. ISBN 978-5-94089-138-4. (Russian)]
- [60] Родионова Е.В., Томилин О.Б., Фомина Л.В. Моделирование возможных пространственных структур переходных состояний ароматических углеводородов. *Журнал органической химии*. **2021**. Т.57. №2. С.157-166. DOI 10.31857/S0514749221020014. [E.V. Rodionova, O.B. Tomilin, L.V. Fomina. Modeling (prediction) of the structure of possible transition states of aromatic hydrocarbons. *Russian Journal of Organic Chemistry*. **2021**. Vol.57. No.2. P.135-142. DOI: 10.1134/S1070428021020019.]
- [61] N. Kochev, V. Paskaleva, N. Jeliaskova. Chemical Information Processing for QSAR/QSPR Modeling. Scientific Researches of the Union of Scientists in Bulgaria. *Plovdiv, Series C. Natural Sciences and Humanities*. **2013**. Vol.16. P.223-226.
- [62] Федина Ю.А., Папулов Ю.Г., Виноградова М.Г. Количественные модели в корреляциях "структура-свойство" органических соединений. *Вестник ТвГУ. Серия: Химия*. **2012**. Т.14. С.160-172. [Yu.A. Fedina, Yu.G. Papulov, M.G. Vinogradova. Quantitative models in correlation "structure - property" organic compounds. *Bulletin of Tver State University. Series: Chemistry*. **2012**. Vol.14. P.160-172. (Russian)]
- [63] N. Bouarra, S. Kherouf, A. Bouakkadia, D. Messadi. QSPR Application on Modeling of Boiling Point of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons. *Research Journal of Pharmaceutical, Biological and Chemical Sciences*. **2017**. Vol.8. No.6. P.19-28.
- [64] Долوماتов М.Ю., Коледин О.С., Ковалева Э.А., Аубекеров Т.М. Прогнозирование физико-химических свойств компонентов углеводородных систем с применением топологических дескрипторов. Под ред. Е.Н. Офицерова. *Бутлеровское наследие; кн. 4. Казань: Инновационно-издательский дом «Бутлеровское наследие»*. **2021**. 164с. ISBN 978-5-9902124-7-3. [M.Yu. Dolomatov, O.S. Koledin, E.A. Kovaleva, T.M. Auberkerov. Prediction of the physicochemical properties of the components of hydrocarbon systems using topological descriptors. Monograph. Series «Butlerov Heritage». Book 4. Ed. by E.N. Ofitserov. *Kazan: Publishing House Ltd. «Innovation and Publishing House «Butlerov Heritage»*. **2021**. 164p. ISBN 978-5-9902124-7-3. (Russian)]
- [65] Долوماتов М.Ю., Бахтизин Р.З., Долوماتова М.М. Физико-химия наночастиц: учебное пособие для вузов. 2-е изд., перераб. и доп. *Москва: Издательство Юрайт*. **2020**. 285с. ISBN 978-5-534-13077-5. [M.Yu. Dolomatov, R.Z. Bakhtizin, M.M. Dolomatova. Physico-chemistry of nanoparticles: a textbook for universities. 2nd ed., revised and add. *Moscow: Yurayt Publishing House*. **2020**. 285p. ISBN 978-5-534-13077-5. (Russian)]
- [66] Долوماتов М.Ю., Шуляковская Д.О., Карабельская И.В. Интегральные характеристики спектров сложных молекулярных систем и их информационные свойства. *Электротехнические и информационные комплексы и системы*. **2015**. №3. С.113-120.

- [M.Yu.Dolomatov, D.O. Shulyakovskaya, I.V. Karabelskaya. Integral characteristics of the spectra of complex molecular systems and their information properties. *Electrical and Data Processing Facilities and Systems*. **2015**. No.3. P.113-120. (Russian)]
- [67] Доломатова М. М., Бахтизин Р.З. Прогнозирование физико-химических свойств стохастических многокомпонентных молекулярных систем по спектроскопическим дескрипторам в УФ- и видимой области. *Вестник Башкирского университета*. **2020**. Т.25. №4. С.802-807. DOI 10.33184/bulletin-bsu-2020.4.16. [M.M. Dolomatova, R.Z.Bakhtizin Prediction of physical and chemical properties of stochastic multicomponent molecular systems by spectroscopic descriptors in the uv and visible regions. *Vestnik bashkirskogo universiteta*. **2020**. Vol.25. No.4. P.802-807. DOI 10.33184/bulletin-bsu-2020.4.16. (Russian)]
- [68] Хайрудинов Р.И., Кузьмина З.Ф., Доломатова М.М., Доломатов М.Ю., Хайрудинов И.Р. Взаимосвязь количества ароматических и нафтенных углеводородов фракций высоковязких нефтей с интегральными характеристиками оптических спектров. *Бутлеровские сообщения*. **2018**. Т.53. №1. С.46–52. DOI:10.37952/ROI-jbc-01/18-53-2-46. [R.I. Hairudinov, Z.F. Kuzmina, M.M. Dolomatova, M.Yu. Dolomatov, I.R. Hairudinov. Relationship between aromatic and naphthenic hydrocarbons amount for fractions of high-viscosity petroleum and integral optical spectral characteristics. *Butlerov Communications*. **2018**. Vol.53. No.1. P.46–52. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/18-53-2-46 (Russian)]
- [69] Доломатова М.М., Хайрудинов Р.И., Хайрудинов И.Р., Манапов Р.С., Доломатов М.Ю. О возможности прогнозирования фракционного состава высоковязких нефтей по интегральным характеристикам оптических спектров. *Бутлеровские сообщения*. **2019**. Т.60. №12. С.43-48. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/19-60-12-43 [M.M. Dolomatova, R.I. Hairudinov, I.R. Hairudinov, R.S. Manapov, M.Yu. Dolomatov. Predicting possibility of the fractional composition high-viscosity oils by the integral optical spectral characteristics. *Butlerov Communications*. **2019**. Vol.60. No.12. P. 43-48. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/19-60-12-43. (Russian)]
- [70] Доломатов М.Ю. Исследования сложных углеводородных систем. Новые оптические методы. *Neftegaz.ru*. **2018**. №3. С.26-32. [M.Yu. Dolomatov. Investigation of complex hydrocarbon systems. New optical methods. *Neftegaz.ru*. **2018**. No.3. P.26-32. (Russian)]
- [71] Ковалева Э.А. Электронная феноменологическая спектроскопия в исследовании полициклических углеводородов. *Бутлеровские сообщения В*. **2026**. Т.12. №1. Id.3. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/26-85-2-17/ROI-jbc-RB/26-12-1-3
- [72] Ella A. Kovaleva. Electronic phenomenological spectroscopy in the study of polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs). *Butlerov Communications B*. **2026**. Vol.12. No.1. Id.3. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/26-85-2-17/ROI-jbc-B/26-12-1-3

The English version of the article have been published in the international edition of the journal

Butlerov Communications B
Advances in Chemistry & Thermophysics

The Reference Object Identifier – ROI: jbc-B/26-12-1-3

The Digital Object Identifier – DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/26-85-2-17/ROI-jbc-B/26-12-1-3

Electronic phenomenological spectroscopy in the study of polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs)

Ella A. Kovaleva

Ufa State Petroleum Technological University 1 Kosmonavtov St., Ufa, 450064. Russia.

Phone: +7 (917) 406-27-06. E-mail: kovaleva-ugntu@yandex.ru

Keywords: electronic phenomenological spectroscopy, quantum continuum, «structure-property» principle, «spectrum-property» principle, integral descriptors, ionization potential, electron affinity, autocorrelation analysis, polycyclic aromatic hydrocarbons.

Abstract

The paper presents a systematic analysis of electronic phenomenological spectroscopy (EFS) using polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) as a research subject. It is demonstrated that, unlike classical optical spectroscopy, EFS operates with broadband integral spectral characteristics of multicomponent systems and treats molecules as integral objects, considering the spectrum as a quantum continuum. This approach has enabled the identification of «spectrum–property» and «colour–property» correlations without detailed modelling of electronic and molecular structures. Three key principles of EFS have been formulated and justified: integrality – the use of generalized descriptors, including the area under the absorption curve, autocorrelation functions, and colour coordinates; phenomenological nature – establishing correlations between spectral and physicochemical parameters without detailed description of the structure and composition of system components; scalability – applicability of methods to objects of varying complexity, ranging from individual atoms and molecules to multicomponent mixtures with heterogeneous chemical composition. Using PAHs as an example, the paper demonstrates a step-by-step analysis procedure. The experimental validation confirms the effectiveness of several integral parameters: the integral oscillator strength – for evaluating the quantum continuum of spectral density distribution; the logarithmic molar integral absorption coefficient – for rapid calculation of ionization potentials and electron affinities; the integral parameter of the autocorrelation function – for characterizing the correlation interactions between electronic states; colour coordinates (RGB, XYZ) – as descriptors of electronic properties. The study provides corresponding dependencies for calculating molecular energy characteristics based on spectroscopic parameters. It is shown that electronic phenomenological spectroscopy (EFS) effectively reveals structural features of PAHs that correlate with carcinogenic activity. The findings confirm that EFS serves as an efficient tool for identifying hidden patterns in complex organic systems, predicting physicochemical properties of PAHs, and developing rapid analytical methods in organic electronics, materials science, and petrochemistry.