

УДК 547.52

**НОВЫЙ МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ДЕСКРИПТОР МОДЕЛИ "СТРУКТУРА—СВОЙСТВО"
ДЛЯ ОЦЕНКИ ПОТЕНЦИАЛОВ ИОНИЗАЦИИ НАФТО- И АНТРАХИНОНОВ****М.Ю. Долomatov^{1,2}, Э.А. Ковалёва³**¹Бакирский государственный университет, Уфа, Россия

E-mail: Kovaleva-ugntu@yandex.ru

²Уфимский государственный университет экономики и сервиса, Россия³Уфимский государственный нефтяной технический университет, Россия

Статья поступила 11 декабря 2014 г.

Предложен двухпараметрический молекулярный дескриптор в модели QSPR, устанавливающий связь энергий ионизации молекул от топологических индексов и интегральных сил осциллятора. Интегральные силы осцилляторов получены по данным электронной спектроскопии в УФ и видимой областях спектра. Полученные закономерности подтверждаются статистической обработкой данных методами множественного регрессионного анализа в рядах производных 1,4-нафтохинона, 1-оксиантрахинона и 1-(4-трет-бутилфенокси)-9,10-антрахинона.

DOI: 10.15372/JSC20150503

Ключевые слова: молекулярный дескриптор, производные хинонов, потенциалы ионизации, интегральная сила осциллятора, топологические индексы, QSPR.

ВВЕДЕНИЕ

Известно, что топологические индексы (ТИ) молекулярных графов (МГ) органических соединений в моделях QSPR хорошо коррелируют с физико-химическими свойствами молекул, например с молекулярным объемом, молекулярной рефракцией, площадью поверхности молекулы, потенциалами ионизации, сродством к электрону, поляризуемостью, химическими сдвигами в спектрах ЯМР, спиновыми плотностями и др. В обзоре [1, 2] отмечается, что потенциалы ионизации верхних π -уровней энергии могут быть аппроксимированы с достаточно высокой степенью точности (стандартное отклонение не превышает 0,1 эВ) с помощью аналитических выражений, вид которых определяется спектром МГ.

Недостатком существующих молекулярных дескрипторов является использование хюккелевских МГ, которые не учитывают все взаимодействия в молекулах и ограничиваются только π -электронами. В данной работе в качестве молекулярного дескриптора, описывающего все виды взаимодействия электронов в молекулярной системе, предложен эмпирический индекс, характеризующий суммарную энергию электронных переходов, так называемую интегральную силу осциллятора (ИСО). Логарифмическая ИСО (θ) характеризует всю совокупность физических и химических свойств системы и определяется по формуле

$$\theta = \int_{\lambda_0}^{\lambda_k} \lg(\epsilon_\lambda) d\lambda, \quad (1)$$

где λ_0 , λ_k — границы спектра, нм; $\lg(\epsilon_\lambda)$ — логарифм молярного показателя поглощения при определенных длинах волн.

Коэффициенты для формулы (2)

№ п/п	Соединение	Коэффициент		Коэффициент корреляции R
		α , эВ	β , эВ·нм ⁻¹	
1	Производные 1,4-нафтохинона	9,7037	-0,002	0,91
2	Производные антрахинона, содержащие группу ОСОСН ₃	11, 809	-0,0063	0,98
3	Производные антрахинона с заместителями ОС ₆ Н ₄ С(СН ₃) ₃	8,2794	0,0007	0,87
4	Производные антрахинона	14,342	-0,0066	0,95
5	Соединения антрахинона, содержащие аминную и морфолиновую группы	12,093	-0,0051	0,92

Физический смысл зависимостей (1) объясняется эффектом корреляции электронов и заключается в том, что на состояние каждого из электронов квантовой системы влияют все остальные электроны, в том числе глубинные электроны нижележащих уровней [3]. Двойные связи косвенно учитываются в ИСО, так как она включает в области 200—900 нм π — π^* и n — π переходы электронных молекулярных орбиталей объектов исследования, поэтому необходимости в отдельном учете двойных связей нет.

Ранее было показано [4—6], что в отдельных гомологических рядах наблюдается четкая корреляция между энергиями ионизации, сродством к электрону и интегральными силами осциллятора. Например, зависимости потенциалов ионизации (ПИ) от интегральных сил осциллятора определялись по формуле

$$\text{ПИ} = \alpha + \beta\theta, \quad (2)$$

где α , эВ и β , эВ/нм — константы; θ — логарифмическая интегральная сила осциллятора, нм; ПИ — потенциал ионизации (квантово-химический дескриптор), эВ.

В работах, проведенных ранее [6], приведены полученные коэффициенты формулы (2).

Как следует из табл. 1, существующие зависимости пригодны для узкого класса сложных органических молекул однородной структуры и не учитывают разнообразия молекул. Поэтому предлагается дополнить энергетическую спектральную составляющую топологической составляющей, которая выражается через определенный топологический индекс, например, индекс Винера или Платта.

Рассматривая стационарные состояния молекул, мы записали химическую структурную формулу в виде МГ, вершины которого соответствуют атомам (ядрам), а ребра — химическим связям молекулы, при этом рассматривали только скелетные атомы и связи между ними. Для того чтобы учесть гетероатомы и кратные связи, была введена матрица расстояний D , построенная с учетом весов, приписываемых вершинам и ребрам молекулярного графа. Для описания графа применяли инварианты графа — топологические индексы (дескрипторы) Винера и Платта [2], которые отражают размеры и сложность молекулы — наличие функциональных групп, количество связей и атомов.

В работе изучали зависимость потенциалов ионизации от логарифмической силы осциллятора и топологических индексов.

Основная идея работы состоит в предположении, что спектр собственных значений энергий квантовой системы из m молекул E описывается определенным функционалом от энергетической характеристики всех электронных состояний (гамильтонианами), каждый из которых определяет свойства молекул и выражается через подмножества функционалов θ и топологических характеристик молекул П

$$E = F(\theta, \text{П}), \quad (3)$$

где П — топологический параметр; функционал $\theta(\epsilon, \lambda)$ представляет собой так называемую интегральную силу осциллятора, которая является суммой всех сил осцилляторов и зависит от оптической плотности ϵ и длины волны λ , нм. Функционал θ построен на классе несепарабель-

ных, гладких, ограниченных функций, которые, в свою очередь, являются суперпозицией дискретных, спектральных функций и могут быть представлены, например, функциями f от рядов Фурье для m молекул

$$\theta(\varepsilon, \lambda) = f\left(\sum_m \sum_n A_{mn} \cdot e^{inkt}\right), \quad k = \frac{2\pi}{\lambda},$$

где A_{mn} — константа; t — время, с; n — число членов ряда Фурье; i — комплексная единица.

В данном случае предполагается, что эта функция непериодическая, поэтому она может быть представлена только суммой бесконечно большого числа бесконечно близких по частоте колебаний с бесконечно малыми амплитудами. С чисто математических позиций множество функций e^{inkt} , $-\infty < n < \infty$ образует бесконечномерный базис линейного пространства $L^2[a; b]$ ортогональных синус-косинусных функций. В частности, $\theta(\varepsilon, \lambda)$ может быть представлен более гладкой логарифмической функцией, для которого не рассматриваются особые точки, так как они не попадают в область определения. Из этого предположения следует, что любое состояние молекулы должно задаваться функционалом от структуры и квантовой характеристики, характеризующей энергию взаимодействия электронов в молекуле. Из формального определения спектра следует, что спектр является некоторой функцией одних лишь статистик второго порядка, относительно которых, в свою очередь, предполагается, что они остаются неизменными или стационарными во времени.

Предположим, что в рядах молекул, близких по химической природе, содержащих атомы одного вида, потенциалы межчастичного взаимодействия близки между собой. Тогда отклонение функционала от некоторого исходного значения ΔF будет характеризовать электронное состояние молекулы с данной структурой.

Считая функционал E непрерывной функцией двух переменных, разложим его в ряд Тейлора по степеням $(\theta - \theta_0)$ и $(\Pi - \Pi_0)$ и некоторого остаточного члена

$$E = F(\theta, \Pi) = f(\theta_0, \Pi_0) + \frac{\theta - \theta_0}{1!} \cdot \frac{\partial f(\theta_0, \Pi_0)}{\partial \theta} + \frac{(\theta - \theta_0)^2}{2!} \cdot \frac{\partial^2 f(\theta_0, \Pi_0)}{\partial \theta^2} + \frac{(\theta - \theta_0)^3}{3!} \cdot \frac{\partial^3 f(\xi_1, \Pi_0)}{\partial \theta^3} + \\ + \frac{\Pi - \Pi_0}{1!} \left[\frac{\partial f(\theta_0, \Pi_0)}{\partial \Pi} + \frac{\theta - \theta_0}{1!} \cdot \frac{\partial^2 f(\theta_0, \Pi_0)}{\partial (\Pi \theta)} + \frac{(\theta - \theta_0)^2}{2!} \cdot \frac{\partial^3 f(\xi_2, \Pi_0)}{\partial (\Pi \theta^2)} \right] + \\ + \frac{(\Pi - \Pi_0)^2}{2!} \left[\frac{\partial^2 f(\theta_0, \Pi_0)}{\partial (\Pi)^2} + \frac{\theta - \theta_0}{1!} \cdot \frac{\partial^3 f(\xi_3, \Pi_0)}{\partial (\Pi^2 \theta)} \right] + \frac{(\Pi - \Pi_0)^3}{3!} \cdot \frac{\partial^3 f(\theta, \eta_1)}{\partial (\Pi)^3},$$

где $\eta_1 = \Pi_0 + \mu_1(\Pi - \Pi_0)$, $0 < \mu_1 < 1$; $\xi_1 = \theta + \mu_2(\theta - \theta_0)$, $0 < \mu_2 < 1$; $\xi_2 = \theta + \mu_3(\theta - \theta_0)$, $0 < \mu_3 < 1$; $\xi_3 = \theta + \mu_4(\theta - \theta_0)$, $0 < \mu_4 < 1$.

При $n = 2$ формула примет вид

$$F(\theta, \Pi) = A_0 + D(\theta - \theta_0) + E(\Pi - \Pi_0) + \\ + [A(\theta - \theta_0)^2 + 2B(\theta - \theta_0)(\Pi - \Pi_0) + C(\Pi - \Pi_0)^2] + R_2, \quad (4)$$

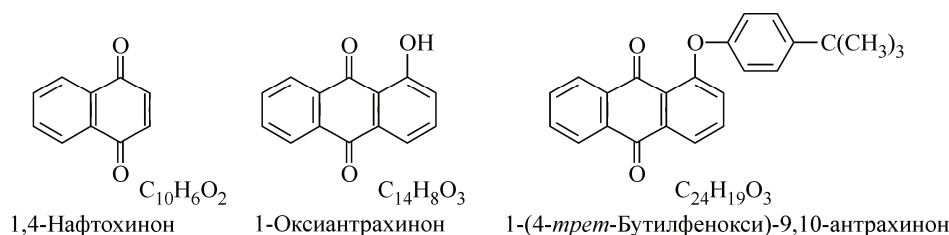
где коэффициенты A_0, D, E, A, B, C не зависят от θ и Π ; R_2 — остаточный член, структура которого аналогична структуре остаточного члена в формуле Тейлора для функции одной переменной. Полагая $\theta_0 = 0$ и $\Pi_0 = 0$, $R_2 \rightarrow 0$ перепишем формулу (4) в виде

$$F(\theta, \Pi) = A_0 + D \cdot \theta + E \cdot \Pi + A \cdot \theta^2 + 2B \cdot \theta \cdot \Pi + C \cdot \Pi^2. \quad (5)$$

Физический смысл коэффициентов заключается в характеристике возмущения функционала под влиянием структурных топологических факторов и факторов электронного взаимодействия. Разложение (5) представляет собой квадратичную функцию двух переменных.

МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

В качестве объектов исследования в данной работе выбраны производные 1,4-нафтохинона, 1-оксидантрахинона и 1-(4-*трет*-бутилфенокси)-9,10-антрахинона (схема).



Значения ПИ (табл. 2) рассчитывали методом RHF 6-31G** по теореме Купманса, согласно которой [8] энергии высших занятых молекулярных орбиталей по абсолютной величине совпадают с потенциалами ионизации молекулы. В качестве структурных параметров рассматривали топологические индексы Винера и Платта [9—11]. Выбор данных топологических индексов обусловлен простотой их расчета и хорошей описательной способностью.

Индекс Винера определяли как полусумму топологических расстояний между всеми n атомами в молекулярном графе и рассчитывали по следующей формуле

$$W(G) = \frac{1}{2} \cdot \sum_{i=1}^n \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n d_{ij} + \sum_{i=1}^n d_{ii}, \quad d_{ii} = 1 - \frac{6}{Z_i}, \quad d_{ij} = \frac{1}{b} \cdot \frac{36}{Z_i Z_j},$$

где Z_i и Z_j — заряды ядер (числа всех электронов) атомов i и j ; b — кратность связи между атомами; d_{ij} — элементы матрицы расстояний.

Индекс Платта определен как сумма числа связей, смежных с каждой из связей в молекуле или в другой химической частице по формуле

$$F(G) = \sum_{f=1}^{f_{\text{полн}}} \text{deg } e_f,$$

где $\text{deg } e_f$ — число ребер, смежных с ребром f ; $f_{\text{полн}}$ — полное число ребер в графе G .

Коэффициенты зависимости (4) были получены методом многофакторного регрессионного анализа в соответствии с моделями QSPR.

Точность полученных моделей в QSPR подходе оценивали с помощью статистических характеристик — коэффициента корреляции, коэффициента множественной корреляции и стандартной ошибки.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

В табл. 3 представлены данные коэффициентов квадратичной функции (5).

Коэффициент корреляции $R \approx 0,97$. Для статистической достоверности посчитали корреляционную поправку $S_r = \frac{1-R^2}{\sqrt{n-1}}$ для $n > 30$. В нашем случае $S_r = 0,01$ и $\left| \frac{R}{S_r} \right| = \left| \frac{0,97}{0,01} \right| = 97 \geq 3$, сле-

довательно, связь нельзя считать случайной. Регрессионное уравнение проходит через центр облака исходных точек, но, как показывает t -статистика, коэффициенты A и D незначимы. Следовательно, равенство (5) запишется в виде

$$F(\theta, TI) = A_0 + E \cdot TI + 2B \cdot \theta \cdot TI + C \cdot TI^2. \quad (6)$$

Для характеристики качества регрессионного уравнения был вычислен коэффициент множественной корреляции $R \approx 0,97$, указывающий на весьма сильную связь всего набора факторов с результатом. Однако, коэффициенты E , $2B$ и C нельзя интерпретировать как показатели раздельного влияния ИСО и ТИ на ПИ, так как с изменением ИСО фактор ТИ, как правило, изменяется. Коэффициент A_0 является характеристикой всего гомологического ряда хинонов. Мы полагаем, что полученный двухпараметрический дескриптор (6) можно применять для оценки электронной структуры, процессов переноса зарядов донорно-акцепторных комплексов и в исследованиях орбитально-контролируемых реакций с участием хинонов.

Т а б л и ц а 2

Квантовые и структурные параметры производных
1,4-нафтохинона, 1-оксиантрахинона и 1-(4-трет-бутилфенокси)-9,10-антрахинона

№	Название	Брутто-формула	ЛФ ИСО, нм	ПИ, эВ 6-31G**	Топологический индекс		ПИ, рассчитанные по формуле (5) с ТИ	
					Винера	Платта	Винера	Платта
1	2	3	4	5	6	7	8	9
1	2-Анилино-1-оксиантрахинон	C ₂₀ H ₁₃ NO ₃	786	9,11	1278	78	9,10	9,09
2	2-(4-трет-бутилфенил)амино-1-оксиантрахинон	C ₂₄ H ₂₁ NO ₃	811	9,07	2087	94	9,04	9,04
3	2-(N-метил-N-фениламино)-1-оксиантрахинон	C ₂₁ H ₁₅ NO ₃	771	9,29	1394	82	9,11	9,10
4	2-N-метил-N-(3-метилфенил)амино-1-оксиантрахинон	C ₂₂ H ₁₇ NO ₃	771	9,24	1563	86	9,10	9,09
5	2-N-метил-N-(4-трет-бутилфенил)амино-1-оксиантрахинон	C ₂₅ H ₂₃ NO ₄	762	9,41	2230	98	9,08	9,08
6	2-N-этил-N-(4-трет-бутилфенил)амино-1-оксиантрахинон	C ₂₆ H ₂₅ NO ₃	820	9,00	2402	100	9,02	9,02
7	2-N-бензил-N-(4-трет-бутилфенил)амино-1-оксиантрахинон	C ₃₁ H ₂₇ NO ₃	806	8,96	3550	116	9,00	9,01
8	2-Дифениламино-1-оксиантрахинон	C ₂₆ H ₁₇ NO ₃	825	8,94	2217	98	9,02	9,02
9	2-N-фенил-N-(4-трет-бутилфенил)амино-1-оксиантрахинон	C ₃₀ H ₂₅ NO ₃	830	8,88	3224	114	8,98	8,99
10	2-Этиламино-1,4-нафтохинон	C ₁₂ H ₁₁ NO ₂	1188,5	8,63	342	44	8,84	8,85
11	2-Морфолино-1,4-нафтохинон	C ₁₄ H ₁₃ NO ₃	1287,35	8,9	563	56	8,74	8,74
12	2-Пиперидино-1,4-нафтохинон	C ₁₅ H ₁₅ NO ₂	1252,47	8,62	563	56	8,77	8,76
13	2-(2-Циклогексен-1-ил)-1,4-нафтохинон	C ₁₆ H ₁₄ O ₂	653,56	9,39	563	56	9,26	9,24
14	2-Аллил-1,4-нафтохинон	C ₁₃ H ₁₀ O ₂	618,91	9,4	342	44	9,31	9,28
15	2-Бензил-1,4-нафтохинон	C ₁₇ H ₁₂ O ₂	668,45	9,02	692	58	9,24	9,22
16	2-Дифенилметил-1,4-нафтохинон	C ₂₃ H ₁₆ O ₂	683,33	8,89	1346	78	9,19	9,18
17	2-Метиламино-3-амино-1,4-нафтохинон	C ₁₁ H ₁₀ N ₂ O ₂	1765,74	8,5	322	46	8,41	8,43
18	2-Ацетиламино-3-метиламино-1,4-нафтохинон	C ₁₃ H ₁₂ N ₂ O ₃	1272,7	8,89	548	54	8,76	8,76
19	2-Ацетиламино-3-диметиламино-1,4-нафтохинон	C ₁₄ H ₁₄ N ₂ O ₃	1575,97	8,83	626	58	8,52	8,51
20	2-Диметиламино-3-амино-1,4-нафтохинон	C ₁₂ H ₁₂ N ₂ O ₃	1406,89	8,53	383	50	8,67	8,67
21	2-Морфолино-3-амино-1,4-нафтохинон	C ₁₄ H ₁₄ N ₂ O ₃	1333,39	8,66	632	60	8,70	8,69
22	2-Пиперидино-3-амино-1,4-нафтохинон	C ₁₄ H ₁₄ N ₂ O ₂	1491,32	8,54	632	60	8,58	8,57
23	3-Пропиониламино-2-пиперидино-1,4-нафтохинон	C ₁₈ H ₂₀ N ₂ O ₃	1540,4	8,48	1070	70	8,50	8,49
24	2-Пиперидино-3-циклогексиламино-1,4-нафтохинон	C ₂₁ H ₂₆ N ₂ O ₂	1481,32	8,47	1358	78	8,52	8,51
25	2-Ацетилциклогексиламино-3-пиперидино-1,4-нафтохинон	C ₂₃ H ₂₈ N ₂ O ₃	1436,2	8,53	1739	88	8,52	8,51
26	2-п-Толуидино-3-диметиламино-1,4-нафтохинон	C ₁₉ H ₁₈ N ₂ O ₂	1951,14	8,13	1116	72	8,18	8,17
27	2-п-Толуидино-3-диэтиламино-1,4-нафтохинон	C ₂₁ H ₂₂ N ₂ O ₂	1912,06	8,13	1049	76	8,18	8,18
28	2-Ацетил-п-толуидино-3-диэтиламино-1,4-нафтохинон	C ₂₃ H ₂₄ N ₂ O ₃	1431,09	8,51	1762	86	8,52	8,52

О к о н ч а н и е т а б л . 2

1	2	3	4	5	6	7	8	9
29	2- <i>n</i> -Толуидино-3-пиперидино-1,4-нафтохинон	C ₂₂ H ₂₂ N ₂ O ₂	2025,57	8,01	1537	82	8,08	8,06
30	2- <i>n</i> -Толуидино-3-морфолино-1,4-нафтохинон	C ₂₁ H ₂₀ N ₂ O ₃	1832,75	8,06	1537	82	8,22	8,21
31	2-(3-Нитрофениламино)-3-пиперидино-1,4-нафтохинон	C ₂₁ H ₁₉ N ₃ O ₄	1842,06	8,25	1892	88	8,18	8,17
32	2-(4-Нитрофениламино)-3-пиперидино-1,4-нафтохинон	C ₂₁ H ₁₉ N ₃ O ₄	1835,8	8,21	1949	88	8,18	8,18
33	2-(2-Карбоксифениламино)-3-пиперидино-1,4-нафтохинон	C ₂₂ H ₂₀ N ₂ O ₄	1895,34	8,05	1835	88	8,15	8,14
34	2-(3-Карбоксиметоксифениламино)-3-пиперидино-1,4-нафтохинон	C ₂₃ H ₂₂ N ₂ O ₄	1866,95	8,22	1892	88	8,16	8,15
35	2-(4-Карбоксиметоксифениламино)-3-пиперидино-1,4-нафтохинон	C ₂₃ H ₂₂ N ₂ O ₄	1862,06	8,25	2184	90	8,14	8,14
36	2-(3-Карбоксифениламино)-3-пиперидино-1,4-нафтохинон	C ₂₂ H ₂₀ N ₂ O ₄	1866,95	8,19	2108	90	8,14	8,14
37	1-(4- <i>трет</i> -Бутилфенокси)-9,10-антрахинон	C ₂₄ H ₂₀ O ₃	375	9,45	1842	9,45	9,16	9,45
38	2-Нитро-1-(4- <i>трет</i> -бутилфенокси)-9,10-антрахинон	C ₂₄ H ₁₉ NO ₅	669	9,16	2335	9,16	9,16	9,16
39	1-(4- <i>трет</i> -Бутилфенокси)-2-окси-9,10-антрахинон	C ₂₄ H ₂₀ O ₄	540	9,32	1987	9,29	9,29	9,29
40	3-Бром-1-(4- <i>трет</i> -бутилфенокси)-9,10-антрахинон	C ₂₄ H ₁₉ BrO ₃	425	9,38	1998	9,40	9,40	9,40
41	2-Ацетиламино-1-(4- <i>трет</i> -бутилфенокси)-9,10-антрахинон	C ₂₆ H ₂₃ NO ₄	444	9,36	2566	9,37	9,37	9,38
42	2-Трифторацетиламино-1-(4- <i>трет</i> -бутилфенокси)-9,10-антрахинон	C ₂₆ H ₂₀ F ₃ NO ₄	469	9,39	3277	9,34	9,34	9,35
43	2-Изобутириламино-1-(4- <i>трет</i> -бутилфенокси)-9,10-антрахинон	C ₂₈ H ₂₇ NO ₄	435	9,35	3038	9,37	9,37	9,38
44	2-Бензоиламино-1-(4- <i>трет</i> -бутилфенокси)-9,10-антрахинон	C ₃₁ H ₂₅ NO ₄	463	9,3	3883	9,34	9,34	9,35
45	2-(4-Нитробензоил)амино-1-(4- <i>трет</i> -бутилфенокси)-9,10-антрахинон	C ₃₁ H ₂₄ N ₂ O ₆	479	9,36	4976	9,34	9,34	9,33
46	2-(1,3,4,5,6-Пентафторбензил)-амино-1-(4- <i>трет</i> -бутилфенокси)-9,10-антрахинон	C ₃₁ H ₂₀ F ₅ NO ₄	455	9,37	5141	9,37	9,37	9,35
47	2-Метиламино-1-(4- <i>трет</i> -бутилфенокси)-9,10-антрахинон	C ₂₅ H ₂₃ NO ₃	630	9,11	2160	9,20	9,20	9,20
48	4-(<i>N</i> -ацетил- <i>N</i> -метиламино)-1-(4- <i>трет</i> -бутилфенокси)-9,10-антрахинон	C ₂₇ H ₂₅ NO ₄	386	9,47	2807	9,42	9,42	9,43
49	2-Дибензиламино-1-(4- <i>трет</i> -бутилфенокси)-9,10-антрахинон	C ₃₈ H ₃₃ NO ₃	581	9,27	5641	9,25	9,25	9,22
50	3-Пиперидино-1-(4- <i>трет</i> -бутилфенокси)-9,10-антрахинон	C ₂₉ H ₂₉ NO ₃	654	9,12	3048	9,16	9,16	9,17
51	1-Гидрокси-2-(4- <i>трет</i> -бутилфенокси)-9,10-антрахинон	C ₂₄ H ₂₀ O ₄	532	9,34	2087	9,30	9,30	9,30
52	2-Диэтиамино-1-(4- <i>трет</i> -бутилфенокси)-9,10-антрахинон	C ₂₈ H ₂₉ NO ₃	690	9,04	2749	9,13	9,13	9,14
53	4-Метиламино-1-(4- <i>трет</i> -бутилфенокси)-9,10-антрахинон	C ₂₅ H ₂₃ NO ₃	675	9,18	2184	9,16	9,16	9,16

Т а б л и ц а 3

Коэффициенты квадратичной функции

Топологический индекс	Коэффициенты квадратичной функции двух переменных					
	<i>A</i>	<i>C</i>	<i>2B</i>	<i>D</i>	<i>E</i>	<i>A₀</i>
Винера	5,59E-08	9,47E-09	-4,8E-08	-0,0009	-4,5E-05	9,8654
Платта	4,43E-08	3,24E-06	-3,1E-06	-0,0007	0,0002	9,7654

ВЫВОДЫ

Предложен молекулярный двухпараметрический дескриптор, устанавливающий связь между ПИ с интегральными характеристиками электронных переходов и топологическими особенностями молекул. Полученная закономерность подтверждается статистической обработкой данных в рядах производных 1,4-нафтохинона, 1-оксиантрахинона и 1-(4-*трет*-бутилфенокси)-9,10-антрахинона.

Двумерную зависимость (6) можно использовать для предсказания ПИ, минуя квантовые расчеты.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Станкевич М.И., Станкевич И.В., Зефиоров Н.С. // Успехи химии. – 1988. – **57**, № 3. – С. 337 – 366.
2. Химические приложения топологии и теории графов / ред. Р. Кинг. – М.: Мир, 1987.
3. Долوماتов М.Ю., Мукаева Г.Р. // Журн. приклад. спектроскопии. – 1992. – **56**, № 4. – С. 570 – 574.
4. Dolomatov M.Yu., Shulyakovskaya D.O., Mukaeva G.R., Jarmuhametova G.U., Latypov K.F. // J. Mater. Sci. Engineer. – 2012. – N 5. – P. 261.
5. Dolomatov M.Yu., Kovaleva E.A. // Appl. Phys. Res. – 2013. – **5**, N 2. – P. 42 – 47.
6. Ковалева Э.А., Долوماتов М.Ю. // Башкир. хим. журн. – 2014. – **21**, № 2. – С. 44 – 50.
7. Dolomatov M.Yu., Raymurzina N.H., Latypov K.F., Kovaleva E.A. // J. Mater. Sci. Engineer. A & B. – 2014. – **3**, N 11. – P. 770 – 774.
8. Степанов Н.Ф. Квантовая механика и квантовая химия. – М.: Мир, 2001.
9. Федина Ю.А., Папулов Ю.Г., Виноградова М.Г. // Вестник ТвГУ. Сер. Химия. – 2012. – № 14. – С. 160 – 172.
10. Харитонова А.Г., Буланова А.В., По К.Х. // Вестник СамГУ. Сер. Естественнонаучная серия. – 2005. – № 2. – С. 207 – 221.
11. Набивач В.М. // Журн. физ. химии. – 1993. – **67**, № 4. – С. 821 – 826.