

УДК 541.6

А.А. ТОРОПОВ, А.П. ТОРОПОВА, Н.Л. ВОРОПАЕВА, И.Н. РУБАН, С.Ш. РАШИДОВА

**АПРОБАЦИЯ ГРАФА АТОМНЫХ ОРБИТАЛЕЙ В КАЧЕСТВЕ ОСНОВЫ
ДЛЯ QSPR-МОДЕЛИРОВАНИЯ ТЕМПЕРАТУР КИПЕНИЯ
ГАЛОГЕНАЛКАНОВ**

Сообщаются результаты использования для QSPR моделирования нормальных температур кипения 276 галогеналканов C1—C4 графов атомных орбиталей, строящихся на основе полных молекулярных графов по описанным в работе правилам. Вершины этих графов представляют атомные орбитали ($1s^1, 2s^2, 2p^1, 2p^2, 3s^2, 3p^1, 3p^2$). Посредством взвешивания локальных инвариантов графов (в качестве локальных инвариантов использовались степени вершин или расширенная связность первого порядка, а также упомянутые типы атомных орбиталей), максимизирующего коэффициент корреляции между дескрипторами и нормальными температурами кипения указанных галогеналканов на обучающей выборке, получено однопараметрическое корреляционное соотношение, которое статистически характеризуется $n = 138, r = 0,9946, s = 6,7 \text{ }^\circ\text{C}, F = 12464$ (обучающая выборка) и $n = 138, r = 0,9922, s = 9,2 \text{ }^\circ\text{C}, F = 8638$ (контрольная выборка).

Выявление корреляционных соотношений структура — свойство (QSPR) с целью моделирования физико-химических свойств различных соединений, как правило, проводится с использованием дескрипторов, вычисляемых из молекулярных графов [1 — 10]. Последние отражают информацию об атомном составе и характере имеющихся в молекулах связей. Информация об электронном строении самих атомов не используется при конструировании таких дескрипторов. Целью данной работы является апробация дескрипторов, вычисляемых исходя из графов атомных орбиталей. Последние строятся на основе полных (с учетом атомов водорода) молекулярных графов посредством замены вершин, представляющих атомы, на группы вершин, представляющих имеющиеся в основном состоянии атома орбитали. Для представления атомов углерода используется пара вершин — $2s^2$ и $2p^2$, для атомов фтора такая группа имеет вид — $2s^2, 2p^2, 2p^2, 2p^1$, для атомов хлора такой группой являются — $3s^2, 3p^2, 3p^2, 3p^1$, атомы водорода представляются одной вершиной — $1s^1$.

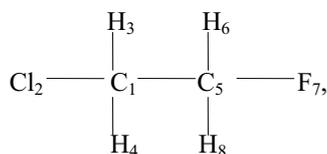
Правила построения матриц смежности графов атомных орбиталей, использованные в данной работе, следующие: (1) вершины, относящиеся к одному атому, не имеют ребер, соединяющих их друг с другом; (2) если два атома в исходном молекулярном графе связаны ребром, то каждая из вершин группы одного из таких атомов связана со всеми вершинами группы, представляющей второй атом. Полученная по указанным правилам матрица смежности атомных орбиталей 1-хлор-2-фторэтана, имеющего нумерацию вершин вида

Т а б л и ц а 1

Характеристики вершин и матрица смежности для графа атомных орбиталей
1-хлор-2-фторэтана

Атомы	C ₁		Cl ₂				H ₃	H ₄	C ₅		H ₆	F ₇				H ₈
Орбитали	2s	2p	3s	3p	3p	3p	1s	1s	2s	2p	1s	2s ²	2p	2p	2p	1s
Заселенности орбиталей	2	2	2	2	2	1	1	1	2	2	1	2	2	2	1	1
Номера орбиталей	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16
ECO _i	6	6	2	2	2	2	2	2	6	6	2	2	2	2	2	2
ECl _i	24	24	12	12	12	12	12	12	24	24	12	12	12	12	12	12

Матрица смежности атомных орбиталей																	
C ₁	2s ²	1	0	0	1	1	1	1	1	1	1	1	0	0	0	0	0
	2p ²	2	0	0	1	1	1	1	1	1	1	1	0	0	0	0	0
Cl ₂	3s ²	3	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	3p ²	4	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	3p ²	5	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	3p ¹	6	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
H ₃	1s ¹	7	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
H ₄	1s ¹	8	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
C ₅	2s ²	9	1	1	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	1	1	1
	2p ²	10	1	1	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	1	1	1
H ₆	1s ¹	11	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	0	0	0	0	0
F ₇	2s ²	12	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	0	0	0	0	0
	2p ²	13	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	0	0	0	0	0
	2p ²	14	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	0	0	0	0	0
	2p ¹	15	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	0	0	0	0	0
H ₈	1s ¹	16	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	0	0	0	0	0



приведена в табл. 1.

Для поиска корреляционных соотношений структура — температура кипения рассмотренных в данной работе галогеналканов использовался дескриптор

$${}^0X^+(\text{ECX}) = \sum_{\text{Все вершины}} \text{CW}(\text{EO}_i) + \text{CW}(\text{ECX}_i), \quad (1)$$

где $\text{CW}(\text{EO}_i)$ — вес присутствия орбитали EO_i ($1s^1, 2s^2, 2p^1, 2p^2, 3s^2, 3p^1, 3p^2$); $\text{CW}(\text{ECX}_i)$ — вес присутствия в структуре вершины со степенью δ_i [1, 3 — 10] (в данной работе для степеней вершин использовано обозначение — ECO_i [1]) или вес присутствия в графе атомных орбиталей вершин, характеризующихся некоторым значением расширенной связности первого порядка [1, 2]. Для последней используется обозначение EC1_i , заимствованное из [1]. ECO_i определялись (для всех вершин, включая $1s^1$) как число вершин, отличных от $1s^1$, связанных с i -й вершиной. Расширенная связность первого порядка вычислялась по формуле [1, 2]

$$\text{EC1}_i = \sum_{(i, j)} \text{ECO}_j, \quad (2)$$

где (i, j) — ребро.

В табл. 1 приведены получаемые указанным образом величины степеней вершин и расширенной связности первого порядка, вычисленные из матрицы

Т а б л и ц а 2

Корреляционные веса набора локальных инвариантов, получающегося при использовании степеней вершин графов атомных орбиталей

Локальный инвариант	Корреляционный вес
Разновидности орбиталей (EO_i)	
$1s^1$	2,095
$2s^2$	0,150
$2p^2$	0,113
$2p^1$	0,238
$3s^2$	2,723
$3p^2$	2,165
$3p^1$	1,878
Степени вершин (ECO_i)	
2	0,175
4	1,771
6	2,755
8	2,186
10	2,257
12	1,233
14	0,563
16	-3,072

смежности атомных орбиталей 1-хлор-2-фторэтана.

Величины весов указанных локальных инвариантов графов атомных орбиталей представлены в табл. 2 для случая использования ECO_i и в табл. 3 — для случая использования EC1_i . Эти веса получены посредством оптимизационной процедуры (метод случайного поиска [3, 11]), максимизирующей величину коэффициента корреляции между дескриптором (1) и величинами температур кипения галогеналканов из [12] на обучающей выборке (табл. 4). В дальнейшем изложении эти веса называются корреляционными. Корреляционные веса использовались в качестве варьируемых параметров, а коэффициент корреляции — в качестве целевой функции [11]. На основе набора локальных инвариантов,

Т а б л и ц а 3

Корреляционные веса набора локальных инвариантов, получающегося при использовании расширенной связности первого порядка графов атомных орбиталей

Локальный инвариант	Корреляционный вес	Локальный инвариант	Корреляционный вес
Разновидности орбиталей (EO _i)		34	-0,171
		36	0,695
1s ¹	2,280	38	-0,809
2s ²	0,351	40	-1,096
2p ²	0,444	42	-1,162
2p ¹	-0,124	44	-1,187
3s ²	2,030	46	-2,300
3p ²	3,144	48	-1,222
3p ¹	1,878	50	-1,758
Расширенная связность (EC1 _i)		52	-2,087
4	0,893	54	-1,791
8	0,921	56	-1,495
12	1,308	58	-1,287
14	-0,691	60	-1,674
16	1,050	62	-2,448
18	-0,495	64	-2,590
20	1,201	66	-2,177
22	0,265	68	-1,926
24	0,651	70	-4,350
26	-0,667	72	-2,872
28	0,694	78	-4,770
30	0,502	86	-5,679
32	0,026	92	-3,923

получающегося при использовании степеней вершин графов атомных орбиталей, описанные действия позволили получить корреляционное соотношение дескриптора (1) с температурами кипения галогеналканов, характеризующееся $n = 138$, $r = 0,9894$, $s = 9,4$ °C, $F = 6338$ (обучающая выборка); $n = 138$, $r = 0,9906$, $s = 10,2$ °C, $F = 7127$ (контрольная выборка). При использовании расширенной связности первого порядка было получено корреляционное соотношение

$$T_{\text{кип}}(\text{°C}) = 4,18 \cdot \text{X}^+(\text{EC1}) - 132, \quad (3)$$

$$n = 138, r = 0,9946, s = 6,7 \text{ °C}, F = 12464 \text{ (обучающая выборка);}$$

$$n = 138, r = 0,9922, s = 9,2 \text{ °C}, F = 8638 \text{ (контрольная выборка).}$$

Результаты расчета по формуле (3) представлены в табл. 4.

Если для описания оптимизации использовать представление в виде "обычных" молекулярных графов, взвешивание степеней вершин дает корреляционное соотношение, характеризующееся $r = 0,985$ и $s = 11$ °C, а взвешивание расширенной связности первого порядка — $r = 0,990$ и $s = 10$ °C. Лучшие прогнозы величин температур кипения 276 галогеналканов C1—C4, основанные на методах структурного подбора [12] и QSPR модели, полученной с помощью нейронных

Т а б л и ц а 4

Сопоставление экспериментальных и вычисленных по корреляционному соотношению (3) величин температур кипения галогеналканов

Название галогеналканов 1	$^{\circ}\text{X}^*$ (ЕС1) 2	$T_{\text{кип}}$, $^{\circ}\text{C}$	
		3	4
Обучающая выборка			
Четырехфтористый углерод	5,723	-128,1	-108,1
Фторэтан	25,742	-37,8	-24,4
Хлорэтан	34,823	12,3	13,6
Трихлорфторметан	32,966	23,7	5,8
Хлордифторметан	22,630	-40,8	-37,4
Дихлорметан	38,649	39,8	29,6
Дифторметан	20,487	-51,7	-46,4
Фторметан	13,815	-78,3	-74,3
1,1,2-Трихлор-2-фторэтан	56,235	102,4	103,1
1,2-Дихлор-2-фторэтан	49,650	73,8	75,5
1,1,2-Трихлор-1,2-дифторэтан	48,851	72,5	72,3
1,1,1-Трихлор-2,2,2-трифторэтан	43,831	45,8	51,2
1-Хлор-1,1,2-трифторэтан	35,065	12,0	14,6
2-Хлор-1,1,1-трифторэтан	35,065	6,9	14,6
1-Хлор-1,1,2,2-тетрафторэтан	30,689	-12,0	-3,7
1,1,2,2-Тетрафторэтан	28,992	-22,8	-10,8
1,1-Дифторэтан	25,624	-25,8	-24,9
1,1,1,2,2,3,3-Гептахлорпропан	90,434	247,0	246,0
1,1,1,2,2,3,3-Гептахлор-3-фторпропан	86,104	236,8	227,9
1,1,2,2,3,3-Гексахлорпропан	87,309	218,5	233,0
1,1,2,2,3-Пентахлор-1,3,3-трифторпропан	67,942	152,3	152,0
1,1,1,3-Тетрахлор-2,2-дифторпропан	67,299	151,2	149,3
1,1,3-Трихлорпропан	67,330	145,5	149,4
1,1,2,2-Тетрахлор-1,3,3-трифторпропан	63,191	134,6	132,1
1,1,3-Трихлор-2,2-дифторпропан	62,530	127,3	129,4
1,1,3,3-Тетрахлор-1,2,2,3-тетрафторпропан	58,861	114,0	114,0
1,1,1,3-Тетрахлор-2,2,3,3-тетрафторпропан	58,861	113,9	114,0
1,1,2,2-Тетрахлор-1,3,3,3-тетрафторпропан	58,861	112,3	114,0
1,2,2,3-Тетрахлор-1,1,3,3-тетрафторпропан	58,861	112,2	114,0
1,1,3-Трихлор-1,2,2-трифторпропан	58,218	109,5	111,4
2,3-Дихлор-1,1,2,3-тетрафторпропан	50,985	89,8	81,1
1,2,3-Трихлор-1,1,3,3-тетрафторпропан	52,881	88,0	89,0
1-Хлор-3-фторпропан	51,106	81,0	81,6
2,2,3-Трихлор-1,1,1,3,3-пентафторпропан	49,780	72,0	76,1
1-Хлор-2,2-дифторпропан	44,392	55,1	53,6
1-Хлор-1,2-дифторпропан	44,795	52,9	55,2
2-Хлорпропан	39,219	35,7	31,9
1,3-Дихлор-1,1,2,2,3,3-гексафторпропан	40,699	35,7	38,1
2-Хлор-2-фторпропан	41,252	35,2	40,4
3,3-Дихлор-1,1,1,2,2,3-гексафторпропан	40,699	35,0	38,1

Продолжение табл. 4

1	2	3	4
3-Хлор-1,1,1,2,2-пентафторпропан	40,056	27,6	35,4
1,1,1,2,3,3-Гексафторпропан	32,914	5,0	5,6
1,1,1,2,2,3-Гексафторпропан	30,975	1,2	-2,5
2-Хлор-1,1,1,2,3,3,3-гептафторпропан	31,618	-2,0	0,2
2-Фторпропан	30,138	-9,7	-6,0
1,1,1-Трифторпропан	30,039	-12,5	-6,4
1,1-Дихлор-1,2,2-трифторэтан	39,770	30,2	34,2
1,2-Дихлор-1,1,2-трифторэтан	39,770	28,2	34,2
1,1,2-Трихлор-1-фторэтан	53,227	88,5	90,5
1,1,1-Трихлор-2,2-дифторэтан	48,851	73,0	72,2
1,1,2-Трихлор-2,2-дифторэтан	48,851	71,2	72,2
1,1,1,2,2-Пентахлорэтан	67,013	161,9	148,1
1,1,2,2,3-Пентахлор-3,3-дифторпропан	72,272	168,4	170,1
1,1,2,3,3-Пентахлор-1,3-дифторпропан	71,043	167,4	165,0
1,1,1,2,2-Пентахлор-3,3,3-трифторпропан	67,942	153,0	152,0
1,1,1,2,3-Пентахлор-2,3,3-трифторпропан	67,942	153,3	152,0
1,1,1,3,3-Пентахлор-2,2,3-трифторпропан	67,942	153,0	152,0
1,1,2-Трихлорпропан	62,957	133,0	131,2
3,3,3-Трихлор-1,1,1,2,2-пентафторпропан	49,780	70,5	76,1
1,1,2-Трихлор-1,2-дифторпропан	54,374	97,7	95,3
1,1,3-Трихлор-3,3-дифторпропан	57,566	107,8	108,6
3-Хлор-1,1,1,2,2,3-гексафторпропан	35,948	20,0	18,3
1,1-Дихлорпропан	50,459	88,1	78,9
1,2-Дихлорпропан	52,818	96,0	88,8
1,3-Дихлорпропан	60,187	120,8	119,6
1,2-Дихлор-1,1,2-трифторпропан	45,293	55,6	57,3
2,3-Дихлор-1,1,1-трифторпропан	50,068	76,7	77,3
1,3-Дихлор-1,1,2,2-тетрафторпропан	49,137	68,2	73,4
1,2,3-Трихлор-1,1-дифторпропан	59,149	114,3	115,2
1,1,1-Трихлор-3,3,3-трифторпропан	56,132	95,1	102,6
2,3,3-Трихлор-1,1,1,3-тетрафторпропан	52,881	87,2	89,0
1,1,3-Трихлор-1,2,2,3-тетрафторпропан	54,110	90,5	94,2
1,1,1,3-Тетрахлорпропан	70,387	158,0	162,2
1,1,2,2-Тетрахлор-1-фторпропан	63,455	135,0	133,2
1,1,1,3-Тетрахлор-3,3-дифторпропан	65,213	132,0	140,6
1,1,1,2-Тетрахлор-3,3,3-трифторпропан	61,962	125,1	127,0
1,1,2,3-Тетрахлор-1,3,3-трифторпропан	63,191	128,7	132,1
1,1,3,3-Тетрахлор-2,2,3-трифторпропан	63,191	127,0	132,1
1,1,2,3-Тетрахлор-1,2,3,3-тетрафторпропан	58,861	112,5	114,0
1,1,1,3-Тетрафторпропан	34,063	29,4	10,4
1,1,1,3,3,3-Гексафторпропан	28,889	0,8	-11,2
1,1,1,2,2,3,3-Гептафторпропан	26,867	-17,0	-19,7
1-Хлор-1-фторпропан	41,378	48,0	41,0
3-Хлор-1,1,1-трифторпропан	43,144	45,1	48,3
2-Хлор-1,1-дифторпропан	44,795	52,0	55,2

Продолжение табл. 4

1	2	3	4
2-Хлор-1,1,1-трифторпропан	37,317	30,0	24,0
1-Фторбутан	43,448	32,2	49,6
1,1,1,2,2,3,3,4,4-Нонафторбутан	33,080	14,0	6,3
Декафторбутан	28,810	-2,0	-11,6
1-Хлорбутан	52,529	78,5	87,6
2-Хлорбутан	47,326	68,5	65,8
1-Хлор-4-фторбутан	59,519	115,0	116,8
1-Хлор-1,1,3,3-тетрафторбутан	46,747	70,5	63,4
4-Хлор-1,1,1,2,2,3,3-гептафторбутан	43,253	54,0	48,8
4-Хлор-1,1,1,2,2,3,3,4,4-нонафторбутан	37,891	30,0	26,4
1,1-Дихлорбутан	58,420	115,0	112,2
1,2-Дихлорбутан	61,743	123,5	126,1
1,3-Дихлорбутан	62,945	133,0	131,1
1,4-Дихлор-1,1,3-трифторбутан	61,585	118,5	125,4
2,3-Дихлор-1,1,1,4,4,4-гексафторбутан	50,430	78,0	78,8
4,4-Дихлор-1,1,1,2,2,3,3-гептафторбутан	51,242	76,5	82,2
4,4-Дихлор-1,1,1,2,2,3,3,4-октафторбутан	46,972	62,8	64,3
3,4-Дихлор-1,1,1,2,2,3,4,4-октофторбутан	46,972	66,0	64,3
1,4-Дихлор-1,1,2,2,3,3,4,4-октофторбутан	46,972	64,0	64,3
1,1,1-Трихлорбутан	62,997	133,5	131,3
1,1,2-Трихлорбутан	68,268	156,8	153,4
1,1,3-Трихлорбутан	67,842	153,8	151,6
1,1,4-Трихлорбутан	74,491	183,8	179,4
2,2,3-Трихлор-1,1,1,4,4,4-гексафторбутан	56,972	104,0	106,1
1,2,4,4-Тетрахлор-1,1,2,3,3,4-гексафторбутан	65,134	134,0	140,3
1,2,3,4-Тетрахлор-1,1,2,3,4,4-гексафторбутан	65,134	134,0	140,3
1,1,2,3,4,4-Гексахлор-1,2,3,4-тетрафторбутан	83,296	208,0	216,2
1-Хлоризобутан	48,262	68,3	69,7
2-Хлоризобутан	45,137	50,7	56,7
1-Хлор-1-фторизобутан	50,234	82,5	78,0
1,3-Дихлоризобутан	64,113	136,0	136,0
1,1-Хлор-1-фторизобутан	53,433	107,0	91,3
1,2,3-Трихлоризобутан	73,067	163,0	173,4
1,1,2,3-Тетрахлоризобутан	78,510	191,0	196,2
1-Фторизобутан	39,181	16,0	31,8
2-Фторизобутан	36,056	12,0	18,7
1,1,1,3,3,3-Гексафторизобутан	36,527	21,5	20,7
1,1,1,3,3,3-Гексафтор-2-фторметилпропан	39,019	40,0	31,1
1,1,1,3,3,3-Гексафтор-2-дифторметилпропан	39,677	33,0	33,8
1,1,1,3,3,3-Гексафтор-2-трифторметилпропан	34,599	12,0	12,6
1,1,1,3,3,3-Гексафтор-2-хлорметилпропан	48,100	58,0	69,1
2,3-Дихлор-1,1,1-трифторизобутан	54,146	93,5	94,3
2,3-Дихлор-1,1,1,3,3-пентафторизобутан	50,192	75,3	77,8
2,3-Дихлор-1,1,1,3,3-пентафторизобутан	47,312	65,0	65,8
1,1,2-Трихлоризобутан	67,803	163,0	151,4

Продолжение табл. 4

1	2	3	4
1,1,1,2-Тетрахлор-3,3,3-трифторизобутан	68,354	148,5	153,7
1,1,1,2,3-Пентахлоризобутан	81,389	211,0	208,2
1-Хлор-1,1,2,2-тетрафторпропан	36,212	19,9	19,4
1,1,1-Трихлорпропан	57,282	104,0	107,4
2,3-Дихлорбутан	60,738	116,0	121,9
2,2,3-Трихлорбутан	66,850	143,0	147,4
2,2-Дифторбутан	37,120	30,9	23,2
1,2-Дифторэтан	31,240	26,0	-1,4
Контрольная выборка			
Хлортрифторметан	14,804	-81,3	-70,1
1,1,1,2,2-Пентахлор-3,3-дифторпропан	72,272	175,0	170,1
1,1,2-Трихлорэтан	58,731	113,7	113,5
1,1,2-Трихлор-3,3,3-трифторпропан	60,157	106,8	119,5
1,1-Дихлор-1,2,2-трифторпропан	45,293	60,2	57,3
3,3-Дихлор-1,1,1-трифторпропан	48,485	72,4	70,7
3-Хлор-1,1,1,3,3-пентафторпропан	37,970	28,4	26,7
2-Хлор-1,1,1,3,3,3-гексафторпропан	34,719	15,5	13,1
1,1,1,2,3,3-Гексахлорпропан	87,400	217,0	233,3
1,1,1,3,3,3-Гексахлор-2,2-дифторпропан	77,023	194,2	190,0
1,1,2,2,3,3-Гексахлор-1,3-дифторпропан	77,023	194,2	190,0
2,3-Дихлор-1,1,1,2,3-пентафторпропан	45,029	56,0	56,2
1,1,2,2,3-Пентахлорпропан	80,692	196,0	205,3
1,1,2,3,3-Пентахлорпропан	82,873	199,0	214,4
1,1,1,2,3,3,3-Гептафторпропан	25,638	-19,0	-24,8
Гексафторэтан	16,588	-78,2	-62,7
1,2-Дихлорэтан	49,402	83,5	74,5
1,1-Дихлор-2,2-дифторэтан	47,154	60,0	65,1
1-Хлор-1,1-дифторпропан	39,120	25,4	31,5
1-Хлор-1,1,2,2,3,3-гексафторпропан	35,948	21,0	18,3
1,2-Дихлор-1,1-дифторпропан	46,398	70,0	61,9
2,2-Дихлорпропан	50,333	69,3	78,4
1-Хлор-2-фторпропан	43,737	68,5	50,8
1,1-Дихлор-1-фторпропан	48,201	66,6	69,5
1,1,1-Трихлорпропан	57,282	108,0	107,4
1,3,3-Трихлор-1,1,2,2-тетрафторпропан	54,110	91,8	94,2
1,1,2,2-Тетрахлор-3,3,3-трифторпропан	63,191	126,2	132,1
1,1,2-Трихлор-2-фторпропан	58,392	116,7	112,1
1,1,1,3,3-Пентахлор-2,2-дифторпропан	72,272	174,0	170,1
1,2,2,3-Тетрахлорпропан	73,781	165,5	176,4
1,1,3,3-Тетрахлорпропан	70,707	161,9	163,6
1,1,1,2,2-Пентафторэтан	21,608	-48,3	-41,7
Октохлорпропан	95,185	259,0	265,9
1,2-Дихлор-1,1-дифторэтан	44,146	46,6	52,5
2-Хлор-1,1-дифторэтан	40,569	35,1	37,6
Гексахлорэтан	71,074	184,4	165,1

Продолжение табл. 4

1	2	3	4
1,1,1,2,2-Пентахлор-2-фторэтан	61,993	137,9	127,1
Хлорметан	22,896	-24,3	-36,3
Дихлордифторметан	23,885	-29,8	-32,2
1,2,3-Трихлорбутан	72,059	166,0	169,2
1,4-Дифторбутан	50,438	77,8	78,8
1,2,3-Трихлор-1,1-дифторизобутан	63,227	132,0	132,3
2,3,3-Трихлор-1,1,1-трифторизобутан	64,179	123,7	136,3
1,1,1,3,3,3-Гексафтор-2-трихлорметилпропан	61,842	107,0	126,5
Декафторизобутан	29,150	-0,3	-10,2
3-Хлор-1,1,1,3,3,3-пентафторизобутан	45,608	59,0	58,6
1,2,3-Трихлор-2-хлорметилпропан	83,774	211,0	218,2
1,1,2,3-Тетрахлор-2-хлорметилпропан	91,181	227,0	249,1
1,1-Хлоризобутан	59,315	105,0	115,9
1,2-Дихлоризобутан	58,594	106,5	112,9
4,4,4-Трихлор-1,1,1,2,2,3,3-гептафторбутан	56,053	96,5	102,3
1,3,4-Трихлор-1,1,2,2,3,4,4-гептафторбутан	56,053	99,0	102,3
2,2,3-Трихлор-1,1,1,3,4,4,4-гептафторбутан	56,053	97,4	102,3
1,1,4,4-Тетрахлорбутан	80,382	200,0	204,0
2,2-Дихлор-1,1,1,3,3,4,4,4-октофторбутан	46,972	64,0	64,3
2,3-Дихлор-1,1,1,2,3,4,4,4-октофторбутан	46,972	64,0	64,3
1,4-Дихлорбутан	68,600	155,0	154,7
1,3-Дихлор-1,1,3-трифторбутан	55,828	129,0	101,4
3,4-Дихлор-1,1,1,2,2,3-гексафторбутан	52,334	72,0	86,8
2-Хлор-1,1,1,4,4,4-гексафторбутан	41,470	51,0	41,3
1-Хлор-1,1-дифторбутан	44,835	55,5	55,4
3-Хлор-1,1,1-трифторбутан	47,168	66,0	65,2
2-Фторбутан	38,245	24,7	27,9
1,1,1,2,2,4,4,4-Октофторбутан	30,810	18,0	-3,2
1,1,2,2,3,3,4,4-Октофторбутан	37,350	43,0	24,1
1-Фторпропан	35,251	-2,3	15,3
Октофторпропан	22,537	-38,0	-37,8
2,2-Дифторпропан	32,171	-0,5	2,5
1,1,2,3-Тетрахлорпропан	74,918	180,0	181,2
1,1,1,2-Тетрахлор-2-фторпропан	63,455	139,6	133,2
2,3-Дихлор-1,1,1,3,3-пентафторпропан	43,800	50,4	51,1
2,3-Дихлор-1,1,1,2,3,3-гексафторпропан	40,699	34,7	38,1
1,2-Дихлор-2-фторпропан	53,473	88,6	91,5
1,2-Дихлор-1-фторпропан	53,876	93,0	93,2
1,1-Дихлор-2,2-дифторпропан	49,311	79,0	74,1
1,3-Дихлор-1,1-дифторпропан	52,225	80,0	86,3
3-Хлор-1,1,1,2,2,3,3-гептафторпропан	31,618	-2,5	0,2
1,2,2-Трихлор-1,1,3,3-тетрафторпропан	54,110	92,0	94,2
1,2,2-Трихлорпропан	62,554	122,0	129,5
1,1,1-Трихлор-2,2-дифторпропан	54,374	102,0	95,3
1,1,1,2,3,3,3-Гептахлорпропан	89,205	249,0	240,9

Продолжение табл. 4

1	2	3	4
1,2-Дихлор-1,1,2,3,3-пентафторпропан	45,029	56,3	56,2
1,1,1,3,3,3-Гексахлорпропан	83,375	206,0	216,5
1,1,1,2,2,3-Гексахлор-3-фторпропан	81,353	210,0	208,1
1,1,1,2,3,3-Гексахлор-3-фторпропан	80,124	207,0	202,9
1,1,2,2,3,3-Гексахлор-1-фторпропан	81,353	210,0	208,1
1,1,2-Трихлор-1,2,2-дифторэтан	43,831	47,6	51,2
1,1,1,2-Тетрахлорэтан	62,308	130,5	128,4
1,1,2,2-Тетрахлорэтан	65,316	146,3	141,0
1,1,1,2-Тетрахлор-2,2-дифторэтан	52,912	91,6	89,2
1-Хлор-2-фторэтан	40,321	53,0	36,5
1-Хлор-1,1-дифторэтан	32,909	-9,8	5,6
1-Хлор-1,1,2,2,2-пентафторэтан	25,669	-38,0	-24,7
1,1,1,2,3-Пентафторпропан	31,906	20,0	1,4
1,1,2,2,3,3-Гексафторпропан	32,823	10,5	5,2
1,1-Дифторпропан	32,297	7,5	3,0
2,2-Дихлор-1,1,1-трифторпропан	45,293	48,8	57,3
1-Хлорпропан	44,332	46,6	53,3
3,3-Дихлор-1,1,1,2,2-пентафторпропан	45,029	45,5	56,2
1,3-Дифторпропан	42,025	41,6	43,7
1,2,3-Трихлор-1,1,2,3,3-пентафторпропан	49,780	73,7	76,1
2,3,3-Трихлор-1,1,1,2,3-пентафторпропан	49,780	73,4	76,1
1,3,3-Трихлор-1,1,2,2,3-пентафторпропан	49,780	73,0	76,1
1,2,2-Трихлор-3,3,3-трифторпропан	58,218	104,5	111,4
1,3-Дихлор-2,2-дифторпропан	55,619	96,7	100,5
1,1,2-Трихлор-1-фторпропан	55,479	113,5	99,9
1,1,1,2-Тетрахлор-2,3,3,3-тетрафторпропан	58,861	112,5	114,0
1,2,3-Трихлор-2-фторпропан	64,700	130,8	138,4
1,1,2,3-Тетрахлор-2,3,3-трифторпропан	63,191	129,8	132,1
1,1,1,2-Тетрахлорпропан	64,560	150,4	137,9
1,1,2,2-Тетрахлор-3,3-дифторпропан	69,147	147,6	157,0
1,2,3-Трихлорпропан	67,753	156,8	151,2
1,1,2,3,3-Пентахлор-1,2,3-трифторпропан	67,942	154,7	152,0
1,1,2,2-Тетрахлорпропан	67,473	153,0	150,0
1,1,1,2,2,3-Гексахлорпропан	85,461	218,0	225,2
1,1,1,2,3,3-Гексахлор-2,3-дифторпропан	77,023	196,0	190,0
1,1,1,2,2,3-Гексахлор-3,3-дифторпропан	77,023	193,4	190,0
1,1,1,2-Тетрафторэтан	25,984	-26,1	-23,4
1,1,1-Трифторэтан	23,828	-47,3	-32,4
1,1,2-Трифторэтан	31,488	5,0	-0,4
1,2-Дихлор-1,1,2,2-тетрафторэтан	34,750	3,6	13,3
2,2-Дихлор-1,1,1,2-тетрафторэтан	34,750	3,6	13,3
1,1-Дихлор-1-фторэтан	41,990	32,0	43,5
2,2-Дихлор-1,1,1-трифторэтан	39,770	28,7	34,2
1-Хлор-1-фторэтан	34,705	16,1	13,1
1,2-Дихлор-1,2-дифторэтан	47,154	58,5	65,1

О к о н ч а н и е т а б л . 4

1	2	3	4
1,1-Дихлорэтан	43,786	57,2	51,0
1,1,2,2-Тетрахлор-1,2-дифторэтан	52,912	92,7	89,2
1,1,1-Трихлорэтан	51,071	74,0	81,5
1,1,1,2-Тетрахлор-2-фторэтан	57,932	117,0	110,2
1,1,2,2-Тетрахлор-1-фторэтан	57,932	116,6	110,2
Трифторметан	13,549	-82,2	-75,4
1,2,2-Трихлор-1,1-дифторпропан	54,374	90,2	95,3
1,2,3-Трихлор-1,1,2,3-тетрафторпропан	54,110	90,0	94,2
Дихлорфторметан	31,711	8,9	0,6
Хлорфторметан	29,568	-9,1	-8,4
Четыреххлористый углерод	42,047	76,7	43,8
Трихлорметан	40,792	61,2	38,5

сетей [13], статистически характеризуются $r = 0,94$ и $s = 26,8$ °C и $r = 0,992$, $s = 8,8$ °C соответственно.

Сопоставление результатов работ [12] и [13] с результатами данной работы указывает, что взвешивание локальных инвариантов графов атомных орбиталей может иметь приложения для QSPR-моделирования.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Bonchev D., Kier L.B.* // J. Math. Chem. – 1992. – 9. – P. 75 – 85.
2. *Химические приложения топологии и теории графов/Пер. с англ. под ред. Р. Кинга.* – М.: Мир, 1987. – 520 с.
3. *Баскин И.И., Станкевич М.И., Девдариани Р.О., Зефиоров Н.С.* // Журн. структур. химии. – 1989. – 30, № 6. – С. 145 – 147.
4. *Петелин Д.Е., Палулин В.А., Зефиоров Н.С.* // Докл. РАН. – 1992. – 324, № 5. – С. 1019 – 1022.
5. *Баскин И.И., Палулин В.А., Зефиоров Н.С.* // Докл. РАН. – 1993. – 332, № 6. – С. 713 – 716.
6. *Потемкин В.А., Барташевич Е.В., Белик А.В.* // Журн. физ. химии. – 1996. – 70, № 3, – С. 448 – 452.
7. *Виноградов М.Г., Папулов Ю.Г., Смоляков В.М., Салтыкова М.Н.* // Там же. – 1996. – 70, № 4. – С. 675 – 680.
8. *Basak S.C., Niemi B., Veith G.V.* // J. Math. Chem. – 1990. – 4. – P. 185 – 205.
9. *Basak S.C., Niemi G.I., Veith G.D.* // Ibid. – 1991. – 7. – P. 245 – 272.
10. *Yao Yu-Yuan, Lu Xu', Yi-Qiu Yang, Xiu-Shun Yuan.* // J. Chem. Int. Comput. Sci. – 1993. – 33, N 4. – P. 590 – 594.
11. *Реклейтис Г., Рейвидран А., Регсдел К.* Оптимизация в технике. – М.: Мир, 1986. – 1. – С. 79, 289.
12. *Basak S.C., Gute B.D., Grunwald G.D.* // Croatia Chim. Acta. – 1996. – 69, N 3. – P. 1159 – 1173.
13. *Balaban A.T., Basak S.C., Colburn T., Grunwald G.D.* // J. Chem. Inf. Comput. Sci. – 1994. – 34, N 5, – P. 1118 – 1121.

Институт химии и физики полимеров
АН Республики Узбекистан
ул. Кодыри 7-Б
Ташкент 700128, Узбекистан

Статья поступила
18 мая 1998 г.,
с доработки —
30 июля 1998 г.