ТОПОЛОГІЧНІ ІНДЕКСИ І ТЕОРІЯ ГРАФІВ В ХІМІЇ

М.О. Афанасьєв, Є.О. Ольховик, А.М. Шкіра
Шосткинський інститут СумДУ
41100, м. Шостка, вул. Інститутська, 6
e-mail: kaf.fznd@gmail.com

Вивчення зв'язку властивостей речовин з їх будовою - одна з основних задач хімії.

Ідея про те, що порядок з'єднання атомів має ключове значення для властивостей речовини, виявилася дуже плідною. На ній ґрунтується уявлення молекул за допомогою графів, в яких атоми грають роль вершин, а хімічні зв'язки між ними - ребер, що з'єднують вершини.

Графи - це математичні об'єкти, тому їх можна характеризувати за допомогою чисел. Звідси з'явилася ідея виражати будову молекул числами, які пов'язані зі структурою молекулярних графів. Ці числа в хімії називають «топологічними індексами». Розрахувавши будь-який топологічний індекс для великої кількості молекул, можна встановити зв'язок між його значеннями і властивостями речовин, і потім використовувати цей зв'язок для передбачення властивостей нових, ще не синтезованих речовин.

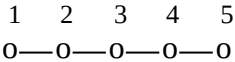
Способи розрахунку топологічних індексів можуть бути найрізноманітнішими, але всі вони повинні задовольняти цілком природним вимогам:

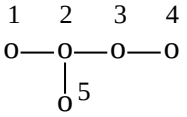
- кожної молекулі відповідає свій, індивідуальний індекс;
- близькі за властивостями молекули мають схожі індекси.

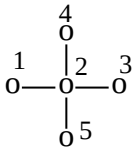
Ключовим для побудови багатьох індексів служить поняття «матриці відстаней» D. Так називають матрицю, елементи якої показують число ребер, які поділяють відповідні вершини молекулярного графа.

Побудуємо цю матрицю для трьох ізомерних вуглеводнів складу C_5H_{12}. Для цього зобразимо їх

молекулярні графи і перенумеруємо вершини (у довільному порядку):







Повні матриці відстаней для наведених графів мають вигляд:

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 2 & 3 & 4 \\ 1 & 0 & 1 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & 0 & 1 & 2 \\ 3 & 2 & 1 & 0 & 1 \\ 4 & 3 & 2 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 0 & 1 & 2 & 3 & 2 \\ 1 & 0 & 1 & 2 & 1 \\ 2 & 1 & 0 & 1 & 2 \\ 3 & 2 & 1 & 0 & 3 \\ 2 & 1 & 2 & 3 & 0 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 0 & 1 & 2 & 2 & 2 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 2 & 1 & 0 & 2 & 2 \\ 2 & 1 & 2 & 0 & 2 \\ 2 & 1 & 2 & 2 & 0 \end{pmatrix}$$

Перший топологічний індекс, що відображає структуру молекулярного графа (G), був запропонований в 1947 р. Вінером. Він визначається як сума елементів головної діагоналі матриці відстаней та напівсума її інших елементів:

$$W(G) = \sum_{i=1}^{n} d_{ii} + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{n} d_{ij}$$

Інший тип індексів заснований не на відстанях між вершинами, а на кількості найближчих сусідів для кожної вершини. Наприклад, індекс Рандіча, який визначається наступним чином:

$$\chi(G) = \sum_{\substack{\text{всем} \\ \text{ребрам}}} \frac{1}{\sqrt{v_i v_j}}$$

Застосовуються топологічні індекси для класифікації органічних сполук і створенням органічних баз даних. Для цього потрібні будуть складні топологічні індекси.

Хімія: наука і практика: збірник тез доповідей XI відкритого студентського науково-практичного семінару, м. Шостка, 19 березня 2014 р. / Відп. за вип. А.Г. Басов. - Суми: СумДУ, 2014. – С. 50-51.