

ТОПОЛОГИЯ ПОЛИЭДРИЧЕСКИХ МОЛЕКУЛ НА ПРИМЕРЕ ПРОИЗВОДНЫХ АДАМАНТАНА

© 2001г. Е.А. Колосова,¹ С.В. Курбатова,² Н.В. Соловова,³
Е.Е. Финкельштейн,⁴ С.Н. Яшкин⁵

В статье рассмотрена топология производных адамантана. Исследованы индексы связанности этих соединений и их корреляции с различными физико-химическими свойствами. Проведенные исследования позволяют оценить особенности межмолекулярных взаимодействий функциональных производных адамантана в условиях газо-жидкостной хроматографии на основе структурных характеристик. С использованием полученных корреляций возможен прогнозирующий расчет величин хроматографического удерживания изученных соединений, а также исследование взаимосвязи строения с их биологической активностью.

Строение молекулы может быть описано с различной степенью детализации. В настоящее время для решения проблемы "структура–свойство" используют достаточно формальные и простые методы, основанные на описании строения молекулы структурной формулой. При таком топологическом способе описания молекулярного строения учитывают лишь типы атомов и характер их связывания, но пренебрегают метрическими характеристиками молекулы. Однако, при кажущейся простоте топологический способ описания строения может вполне адекватно охарактеризовать соединение, так как известно, что многие свойства, особенно в сопряженных π -электронных системах, являются, в первую очередь, следствиями схемы связанности атомов в молекуле [1]–[5]. Следовательно, топологический подход к строению молекул предполагает, прежде всего, исследование порядка взаимодействия атомов в молекуле. Этот факт является основой большинства применений теории графов для изучения молекулярной структуры, к которым можно отнести, в частности,

¹Колосова Елена Александровна, кафедра общей химии и хроматографии Самарского государственного университета, 443011, г.Самара, ул. Акад. Павлова, 1; kolos@ssu.samara.ru

²Курбатова Светлана Викторовна, кафедра общей химии и хроматографии Самарского государственного университета, 443011, г.Самара, ул. Акад. Павлова, 1; curbatsv@ssu.samara.ru

³Соловова Наталья Валентиновна, кафедра общей химии и хроматографии Самарского государственного университета, 443011, г.Самара, ул. Акад. Павлова, 1; solovova@ssu.samara.ru

⁴Финкельштейн Елена Евгеньевна, кафедра общей химии и хроматографии Самарского государственного университета, 443011, г.Самара, ул. Акад. Павлова, 1

⁵Яшкин Сергей Николаевич, кафедра общей химии и хроматографии Самарского государственного университета, 443011, г.Самара, ул. Акад. Павлова, 1; yashkin@ssu.samara.ru

такую модель, как теория молекулярных орбиталей Хюккеля. Поэтому в современной теоретической химии наблюдается тенденция к более широкому использованию математического аппарата для описания молекулярных структур и химических превращений, а теоретико-графовые и топологические представления приобретают все возрастающую роль в исследовании строения и свойств химических соединений.

Для описания структуры молекул в настоящее время достаточно широко используются топологические индексы, получаемые, в основном, путем преобразования химического графа в число. Большинство современных индексов основаны либо на матрице расстояний, либо на матрице смежности. При этом каждый элемент матрицы расстояний представляет собой число ребер, соединяющих две вершины наикратчайшим путем. Элементы матрицы смежности равны либо единице, либо нулю в зависимости от того, связана ли ребром одна вершина графа с другой.

Топологические индексы (ТИ), как правило, рассчитываются в результате формального анализа структуры молекулярного графа. В ряде случаев такой анализ дополняется соображениями качественного характера в выборе критериев для оценки степени разветвленности, компактности молекулы или наличия системы сопряженных двойных и тройных связей [6].

В настоящее время разработаны и применяются разновидности топологических индексов — центрические, составные, теоретико- и тополого-информационные (использование которых базируется на функциях Шэннона), а также тополого-конфигурационные, значения которых определяются не только структурой, но и относительным расположением атомов рассматриваемого соединения на плоскости (т.е. плоской укладкой молекулярного графа) [7]. Описывается применение так называемых трехмерных индексов, при расчете которых используют реальные расстояния между атомами в молекуле [8].

При оценке ряда физико-химических свойств соединений, например, температуры кипения или температуры плавления, существенное значение имеют конкретные оценки размеров молекул и степени их разветвленности, так как именно от этих параметров зависит в значительной степени энергия межмолекулярных взаимодействий [9]–[10]. В топологическом приближении для решения этой задачи используют в основном индексы, характеризующие размеры и форму графа. Часть из них непосредственно связана с матрицей расстояний D .

Индексы, основанные на инвариантном множестве степеней вершин, легко вычислять как для простых, так и для взвешенных графов. Поэтому они относятся к числу наиболее популярных топологических индексов в теоретической химии. Если для построения индексов в качестве подграфов графа G выбраны ребра, то, используя различные симметричные функции от двух переменных $F(x_1, x_2)$, можно определить ряд ТИ, зависящих от степеней вершин графа G : $f = \sum (v_i - v_j - 2)$ — индекс Платто, $M_2 = \sum v_i \cdot v_j$ — индекс Гутмана, $\chi = \sum (v_i \cdot v_j)^{-1/2}$ — индекс молекулярной связанности, или индекс Рэндиша. Используют также индекс молекулярной связанности порядка h , определяемый по формуле:

$$^h\chi = \sum (v_{i_1}, v_{i_2}, \dots, v_{i_{h+1}})^{-1/2}$$

(по путям длины h), где $h \geq 1$ — фиксированное целое число, v_{i_k} — степень вершины i_k на данном пути длины h ($k = 1, \dots, h$) [11]–[13].

Таким образом, к настоящему времени определено большое число разнообразных ТИ, многие из которых находят применение при анализе структуры молекул и построении корреляций между структурой и свойством. Некоторые из ТИ связаны между собой простыми соотношениями с достаточно высоким коэффициентом

корреляции, в таком случае индексы этой группы несут примерно одинаковую информацию о структуре соединений определенных классов.

Одним из наиболее популярных топологических индексов, достаточно широко используемых в теоретической химии, является индекс Рэндича, или индекс связанности (ИС). ИС представляет собой численное описание структуры молекулы и рассчитывается путем математической обработки параметров, приписываемых атомам молекулярного скелета с учетом степени его разветвления, циклизации, ненасыщенности, наличия гетероатомов, и, таким образом, характеризующий молекулярную способность к образованию связей и описывающий топологические свойства молекул [14].

Для углеводородов существует прямое соотношение между валентностью атома углерода (δ_i) и числом атомов водорода (h_i), наличие которых подразумевается при данном атоме i : $\delta_i = 4 - h_i$.

Таким образом, для метильной группы $\delta = 1$, метиленовой группы $\delta = 2$ и т.д. Для молекул, содержащих гетероатомы, при расчете ИС используется понятие о валентной молекулярной связанности, которая включает учет валентных электронов, занимающих σ - и π -орбитали, и орбитали неподеленных пар каждого атома, за исключением связей с водородом. Валентная величина δ_i равна: $\delta_i = Z_i - h_i$, где Z_i — число электронов валентной оболочки. Тогда для атома кислорода в гидроксильной группе значение $\delta_i = 5$, для азота пиридина и хинолина $\delta_i = 5$, для азота первичных аминов $\delta_i = 3$, вторичных $\delta_i = 4$ и т.д. Таким образом, величина δ_i содержит информацию как об объемных, так и об электронных характеристиках молекулы.

Существуют индексы связанности разных порядков. Индекс связанности нулевого порядка рассчитывается по формуле:

$${}^0\chi = \sum_{g=1}^k (\delta_i)^{-1/2}.$$

Индекс связанности первого порядка:

$${}^1\chi = \sum_{g=1}^k (\delta_i \delta_j)^{-1/2},$$

где δ — разность между числом валентных электронов и количеством атомов водорода, связанных с данным атомом; i и j — номера атомов молекулы, формально связанных рассматриваемой связью; δ_i, δ_j — значения δ для двух атомов связи; k — общее число связей в молекуле [15]–[20].

Аналогичным образом рассчитываются индексы связанности второго порядка:

$${}^2\chi = \sum_{g=1}^k (\delta_i \delta_j \delta_l)^{-1/2},$$

третьего и более высоких порядков, учитывающих количество двух, трех, четырех и более соседних связей:

$${}^3\chi = \sum_{g=1}^k (\delta_i \delta_j \delta_l \delta_m)^{-1/2}.$$

Индексы связанности третьего и последующих порядков могут быть представлены в виде индексов цепи χ^p и разветвления χ^c . Индекс связанности первого порядка

учитывает парные взаимодействия соседних атомов в молекуле. К его недостаткам можно отнести невозможность различения мета- и пара- изомеров ароматических соединений. Индексы связанности высоких порядков, учитывающие не только ближайшие парные, но и отдаленные взаимодействия атомов в молекуле, обеспечивают более полное описание структурных особенностей соединений. Таким образом, модель молекулярной связанности позволяет соотносить как общие, так и локальные структурные свойства молекул [21].

Нами топологический подход использован для исследования производных адамантана, представителя каркасных углеводородов, обладающих широким спектром биологического действия. В литературе практически отсутствуют данные о топологических характеристиках этих соединений. Расчет и исследование этих величин и их корреляций с различными физико-химическими параметрами должны представлять, на наш взгляд, несомненный теоретический и практический интерес не только вследствие проявляемой ими биологической активности, но также и в связи с полиэдрической структурой этих молекул.

Сам адамантан (трицикло[3.3.1.1]декан) принадлежит к числу трициклических наftenов мостикового типа. Молекула его состоит из трех конденсированных циклогексановых колец в конформации кресла. Пространственная модель молекулы адамантана — высокосимметричная конструкция с чрезвычайной малой поверхностью и незначительными силами межмолекулярного взаимодействия в кристаллической решетке. До настоящего времени адамантан и его производные используют в качестве моделей для теоретических и экспериментальных исследований пространственных и индукционных эффектов в насыщенных соединениях. Однако данных об исследовании топологических характеристик этих соединений в литературе не найдено. Опубликовано лишь незначительное количество работ по расчету топологических индексов цикланов [29], [30]. При этом указывается, что отождествление графов и отвечающих им топологических объектов является корректным лишь для ациклических графов. При правильном же соотнесении топологических объектов и соответствующих циклических графов можно получить дополнительную информацию, связанную с использованием различных уровней пространственных реализаций графов.

Отнесение адамантана и его производных к полиэдрам может быть осуществлено на основании выполнения для этих соединений соотношения Эйлера [26] $v - e + f = 2$, где v — число вершин, e — число ребер, f — число граней (для адамантана это 10, 12 и 4 соответственно). Разработанная теоретико-графовая модель связывания в полиэдрах базируется на концепции дву- и трехмерной ароматичности. Известно, что в молекулах полиэдров осуществляется делокализованное связывание в том случае, когда имеется несоответствие между степенью вершины многоугольника или многогранника (полиэдра) и числом внутренних орбиталей, поставляемых атомами, находящимися в вершинах. Если же степени вершин точно соответствуют числу внутренних орбиталей, предоставляемых атомами вершин, то в этом случае связывание в полиэдрической молекуле локализовано на ребрах. Поскольку в молекуле адамантана имеются вершины, для которых выполняется как первое, так и второе условие, можно предположить, что в этом случае будет иметь место частичная локализация связи вдоль ребер или, что то же самое, частичная делокализация связи. Другими словами, применение топологической теоретико-графовой модели в данном случае позволяет на основании простых умозаключений предсказать существование эффекта клетки в полиэдрах типа адамантана.

Еще одним фактом "топологического" подтверждения существования эффекта

клетки может служить рассмотрение типов критических точек, определяющих молекулярный граф с позиций зарядового распределения в атоме. Так, известно, что если молекулярный граф содержит цикл связанных атомов, то критическая точка находится во внутренней области цикла. Вообще говоря, рассматривают четыре возможные группы критических точек, т.е. таких точек, в которых величина $\nabla\rho(r, X)$ обращается в нуль: 1) локальный максимум ρ , всегда соответствующий отдельным ядрам; 2) седловая точка, однозначно определяющая линию, соединяющую пару критических точек, то есть пару атомов, и, следовательно, определяющая связевый путь, или просто связь; 3) седловая точка второго рода, однозначно определяющая замкнутую поверхность, содержащую по крайней мере три связанных атома (это поверхность цикла, поскольку связи, соединяющие на ней атомы, должны образовывать замкнутый цикл); 4) локальный минимум ρ , однозначно определяющий "клетку", т.е. конечный замкнутый объем, ограниченный по крайней мере тремя циклами. Определенные таким образом четыре критические точки обозначают соответственно n , b , r , c , величины которых отвечают числу точек каждого типа. Они не зависят друг от друга и связаны соотношением Пуанкаре–Хопфа $n - b + r - c = 1$. Легко видеть, что соотношение Эйлера является частным случаем приведенного уравнения, что представляется вполне закономерным, так как ядра, связи и циклы в уравнении Пуанкаре–Хопфа в силу своих топологических свойств соответствуют вершинам, ребрам и граням в уравнении Эйлера [22]. Таким образом, топологические параметры вполне адекватно характеризуют полиэдрические структуры, к которым относятся и производные адамантана.

С использованием метода структурной аналогии нами были рассчитаны значения индексов Рэндича разных порядков, простые и трехмерные индексы Винера для производных адамантана, определена их дискриминирующая способность, а также исследованы корреляции ТИ с различными физико-химическими параметрами соответствующих производных.

Рассчитанные значения индексов Рэндича различных порядков для структурных аналогов функциональных производных адамантана представлены в табл. 1, 2.

Как следует из таблиц, дискриминирующая способность $^1\chi$, $^2\chi$, $^3\chi$, $^4\chi$ и др. по отношению к группам структурных аналогов достаточно высока. Индексы практически всех порядков различают представителей гомологических рядов, отдельных групп структурных аналогов, а также соединения с одинаковым числом атомов углерода в молекуле.

Дискриминирующая способность этих индексов к отдельным группам аналогов оказывается различной и определяется типом замещения в адамантановом каркасе — природой, количеством и положением заместителей. Заметной оказывается разница в индексах связанности разных порядков для членов гомологических рядов. Так, добавление метиленового звена в гомологическом ряду 1-алкилаадамантанов увеличивает индекс связанности нулевого порядка примерно на 0.70 ед. индекса, индекс первого порядка — на 0.5 ед. индекса.

Таблица 1

Значения индексов связанности для некоторых алкилаадамантанов

Название вещества	$^0\chi$	$^1\chi$	$^2\chi$	$^3\chi$	$^4\chi$	$^5\chi$	$^6\chi$
Адамантан	6.55	4.90	4.88	4.00	3.98	3.27	2.20
1-Метилаадамантан	7.47	5.23	5.72	4.34	4.54	3.44	2.67
2-Метилаадамантан	7.42	5.33	5.29	4.70	4.20	3.74	2.39
1-Этилаадамантан	8.18	5.79	5.77	4.91	4.72	3.90	2.82

2-Этиладамантан	8.13	5.86	5.50	4.89	4.70	3.89	2.81
1,3-Диметиладамантан	8.40	5.57	6.26	4.65	5.31	3.59	3.18
1-Пропиладамантан	8.89	6.29	6.17	4.94	5.13	4.03	3.15
2-Пропиладамантан	8.84	6.37	5.88	5.04	4.84	4.25	2.92
1-Изопропиладамантан	9.05	6.18	5.86	5.31	4.88	4.23	2.95
2-Изопропиладамантан	9.00	6.24	5.67	4.68	5.06	4.04	3.09
1,3,5-Триметиладамантан	9.32	5.91	7.44	4.90	6.21	3.61	3.72
1,3,5,7-Тетраметиладамантан	10.24	6.24	8.30	5.12	6.93	3.62	4.39
1,2-Диметиладамантан	8.34	5.67	6.10	5.25	4.70	3.91	2.78
2,2-Диметиладамантан	8.34	5.66	5.63	5.24	4.40	4.12	2.57
2,4-Диметиладамантан	8.29	5.75	5.71	5.32	4.35	4.12	2.54
1,2,3-Триметиладамантан	9.27	6.02	6.81	5.78	5.30	3.93	3.23
1,2,2-Триметиладамантан	9.27	6.01	6.29	5.96	4.86	4.23	2.90
2,2,4-Триметиладамантан	9.21	6.08	6.05	5.81	4.90	4.48	2.69
2,4,6-Триметиладамантан	9.16	6.18	6.13	5.99	4.75	4.39	2.81
2,3,4-Триметиладамантан	9.21	6.11	6.38	6.10	4.71	4.21	2.86
1,2,3,4-Тетраметиладамантан	10.14	6.50	7.21	6.48	5.66	4.40	3.45
2,2,4,4-Тетраметиладамантан	10.14	7.57	7.40	6.27	5.31	4.74	3.06
1,2,2,3-Тетраметиладамантан	10.19	6.36	7.03	6.64	5.41	4.25	3.30
1,2,3,5-Тетраметиладамантан	10.19	6.35	7.67	6.04	6.03	4.15	3.68
Адамантанол-1	6.92	4.95	5.14	4.00	4.06	3.16	2.28
Адамантанол-2	6.87	5.01	4.92	4.18	3.90	3.31	2.15
1,3-Адамантандиол	7.29	5.02	5.41	4.00	4.21	3.07	2.39
1,2-Адамантандиол	7.24	5.08	5.15	4.22	3.97	3.21	2.21

Таблица 2

Индексы связанности алкиламиноадамантанов

Название вещества	$^0\chi$	$^1\chi$	$^2\chi$	$^3\chi$	$^4\chi$
1-Аминоадамантан	7.05	5.02	5.06	4.08	4.13
1-N-метиламиноадамантан	7.47	5.48	5.23	4.57	4.37
1-N,N-диметиламиноадамантан	8.92	5.85	5.82	4.95	4.56
2-Аминоадамантан	6.99	5.16	4.84	4.33	4.03
2-N-метиламиноадамантан	6.92	5.42	5.07	4.59	4.46
2-N,N-диметиламиноадамантан	8.87	5.97	5.71	4.80	4.80

Таким образом, максимальной дискриминирующей способностью в гомологическом ряду n-алкиладамантанов обладает индекс связанности нулевого порядка.

Индексы связанности различают группы, содержащие структурные аналоги, образованные посредством увеличения числа метильных радикалов в молекуле или удлинением алкильной цепи заместителя. Например, для 1,3-диметил- и 1-этилада-

мантана разница в значениях индексов связанности составляет от 0.20 ед. индекса для ИС 0, 1, 3-го порядков и 1.54 ед. индекса для ИС 2-го порядка, который в данном случае оказывается наиболее информативным. Для более разветвленного 1,3,5-триметиладамантана лучшей дискриминирующей способностью по отношению к пропиладамантану будет обладать индекс нулевого порядка (9.31 и 8.89 соответственно). ИС различных порядков достаточно хорошо различают изомеры положения диалкиладамантанов. Для гомологического ряда алкиладамантилкетонов высокой дискриминирующей способностью также обладают ИС нулевого порядка. Следует отметить, что инкременты метиленового звена ИС разных порядков остаются постоянными для разных гомологических рядов и составляют примерно 0.70, 0.50, 0.40 и т.д. ед. индекса для ИС нулевого, первого и второго порядков соответственно. При переходе к другим группам структурных аналогов величина инкремента изменяется различным образом.

Структура молекул органических соединений определяет их физико-химические свойства. в том числе и величины хроматографического удерживания. Взаимодействие в системе "сорбат-сорбент" является по существу результатом контактирования структурных фрагментов молекул, поэтому математическое моделирование хроматографического удерживания, отражающее особенности таких взаимодействий, дает возможность предсказания хроматографического поведения молекулы вещества в целом, а следовательно, прогнозирующего расчета как хроматографических, так других физико-химических характеристик.

Достаточно широко в последнее время используются так называемые сорбционно-структурные корреляции, описывающие зависимости между хроматографическим удерживанием (сорбционными свойствами) и структурными (топологическими) характеристиками анализируемых веществ [23]–[28]. Такие корреляции применяют для прогнозирования хроматографического удерживания веществ (например, трудно хроматографируемых высококипящих изомеров), прогнозирования свойств гипотетических молекул, поиска новых соединений с заданными свойствами и т.д. Наиболее часто для установления таких корреляций используют индекс связанности. Для установления зависимости между строением молекул сорбатов и их удерживанием были исследованы различные структурные модели, определяющие особенности хроматографического поведения производных адамантана в соответствии с уравнением

$$I = a_0 + \sum a_i \cdot P_i,$$

где I — логарифмический индекс удерживания, P_i — дескриптор, определяемый особенностями структуры сорбата, a_i , a_0 — коэффициенты. Определение коэффициентов осуществляли с помощью метода наименьших квадратов. В качестве дескрипторов P использовали индексы связанности разных порядков, дипольные моменты, объемы молекул и др. Были рассмотрены как моно-, так и полиметрические уравнения. В таблице 3 представлены коэффициенты корреляционных уравнений для различных функциональных производных адамантана с использованием в качестве дескрипторов объема молекулы, дипольного момента, поляризуемости и индексов связанности разных порядков. Примеры графической интерпретации полученных зависимостей представлены на рисунке 1. Как следует из таблицы, во всех случаях наблюдается хорошая корреляция между указанными параметрами.

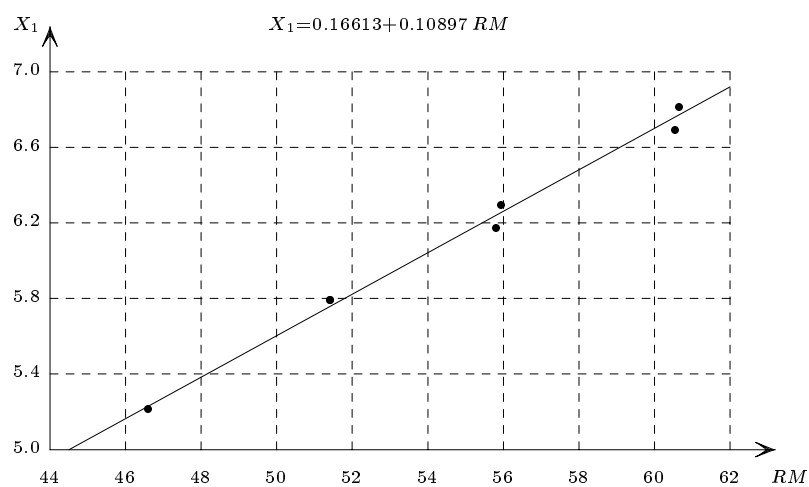
Таким образом, проведенные исследования позволяют оценить особенности межмолекулярных взаимодействий функциональных производных адамантана в условиях газожидкостной хроматографии на основе структурных характеристик. С использованием полученных корреляций возможен прогнозирующий расчет величин

Таблица 3

Коэффициенты уравнения $I = a + by + cz$ для алкиладамантилкетонов

Параметры уравнения	a	b	c	r
Апиезон L				
$^0\chi, \alpha$	562.94	412.06	-114.4	0.998
$^0\chi, \mu$	406.2	113.4	-43.46	0.999
$^0\chi, \nu$	284.02	123.45	-0.3528	0.998
$^1\chi, \alpha$	161.06	91.24	19.35	0.998
$^1\chi, \mu$	217.72	160.61	-20.53	0.998
$^1\chi, \nu$	173.51	94.65	2.03	0.998
$^2\chi, \alpha$	172.12	-3.048	44.89	0.998
$^2\chi, \mu$	108.47	243.12	-92.94	0.999
$^2\chi, \nu$	166.89	20.83	4.48	0.998
$^3\chi, \alpha$	331.4	-85.43	49.89	0.9996
$^3\chi, \mu$	38.59	594.19	-331.21	0.978
$^3\chi, \nu$	357.9	-81.43	5.463	0.999
$^4\chi, \alpha$	212.5	-22.10	45.455	0.999
$^4\chi, \mu$	91.46	547.6	-234.2	0.688
$^4\chi, \nu$	260.5	-30.345	5.048	0.999

Примечание: I — логарифмический индекс удерживания, α — поляризуемость, μ — дипольный момент, χ — индекс связанности, ν — объем молекулы.

Рис. 1. Корреляционная зависимость рефракции (RM) от индекса связанности первого порядка (X_1)

хроматографического удерживания изученных соединений, а также исследование взаимосвязи строения с их биологической активностью.

Литература

- [1] Макаров Л.И. Методика нахождения информативного набора индексов молекулярных графов для прогноза свойств химических соединений// Журн. структ. химии. 1997. Т.38. № 4. С. 795–802.
- [2] Торопов А.А., Торопова А.П., Исмаилов Т.Т., Воропаева Н.Л., Рубан И.Н. Расширенная молекулярная связность: прогноз температур кипения алканов// Журн. структ. химии. 1997. Т.38. № 6. С. 1154–1159
- [3] Герасименко В.А., Набивач В.М. Сорбционно-структурные корреляции алкиланилинов// Журн. физич. химии. 1991. Т.65. № 8. С. 2261–2266.
- [4] Набивач В.М. Корреляционные зависимости термодинамических функций растворения от структурных характеристик углеводородов// Журн. физич. химии. 1992. Т.66. № 3. С. 824–826.
- [5] Набивач В.М., Васильев В.Э. Корреляционные зависимости газохроматографических индексов удерживания от физико-химических свойств и структуры ароматических углеводородов// Журн. физич. химии. 1988. Т.42. № 7. С. 1873–1877.
- [6] Трач С.С. Математические модели в стереохимии. Часть I. Комбинаторные характеристики состава, связности и конфигурации органических молекул// Журн. органич. химии. 1995. Т.31. № 9. С. 1320–1351.
- [7] Меррифилд Р., Симмонс Х. Топология конечного множества и молекулярная структура/ Химические приложения топологии и теории графов. М.: Мир, 1987. С. 11–27.
- [8] Малышева Ю.А., Папулов Ю.Г., Виноградова М.Г., Ботов А.Б., Смоляков В.М. Свойства и строение органических молекул. Часть I. Трехмерные топологические индексы алканов// Журн. структ. химии. 1998. Т.39. № 3. С. 484–492.
- [9] Barysz M., Jashari G., Lall R.S., Srivastava V.K., Trinajstić N. Chemical Applications of Topology and Graph Theory/ King R. B. Amsterdam: Elsevier Science Publishers B. V. 1983. P. 222.
- [10] Руврэ Д. Следует ли заниматься разработкой топологических индексов? / Химические приложения топологии и теории графов. М.: Мир, 1987. С. 183–203.
- [11] Торопов А.А., Торопова А.П., Исмаилов Т.Т., Воропаева Н.Л., Рубан И.Н. Корреляции индексов, вычисляемых по матрице математических топологических расстояний с температурами кипения алкилбензолов// Журн. структ. химии. 1997. Т.38. № 1. С. 167–172.
- [12] Кузьмин В.Е., Коновороцкий Ю.П. Взаимосвязь структурных и топологических характеристик молекул// Журн. структ. химии. 1985. Т.26. № 4. С. 14–21.
- [13] Трач С.С., Девдариани Р.О., Зефиоров Н.С. Комбинаторные модели и алгоритмы в химии. Тополого-конфигурационные аналоги индекса Винера// Журн. органич. химии. 1990. Т.26. № 5. С. 921–932.
- [14] Kier L.B., Hall L.H. Molecular Connectivity in Chemistry and Drug Research. N. Y.: Acad. Press., 1981. V.70. No.6. P. 583.
- [15] Набивач В.М., Бурьян П., Мацак И. Расчет индексов удерживания алкилфенолов по их структурным характеристикам// Журн. аналит. химии. 1988. Т.43. № 8. С. 1483–1488.

- [16] Набивач В.М., Герасименко В.А. Корреляционные уравнения для газохроматографической идентификации ароматических соединений// Журн. аналит. химии. 1996. Т.51. № 11. С. 1149–1157.
- [17] Герасименко В.А., Набивач В.М. Индексы удерживания ароматических углеводородов $C_6 - C_{14}$ на гептафениловом эфире// Журн. аналит. химии. 1988. Т.43. № 1. С. 109–116.
- [18] Набивач В.М., Дмитриков В.П. Использование корреляционных уравнений для предсказания величин удерживания в газожидкостной хроматографии // Успехи химии. 1993. Т.62. № 1. С. 27–37.
- [19] Герасименко В.А., Набивач В.М. Влияние структуры алкильных групп на газохроматографическое удерживание карбонильных соединений// Журн. физич. химии. 1996. Т.70. № 10. С. 1893–1895.
- [20] Герасименко В.А., Набивач В.М. Сорбционно-структурные корреляции в хроматографии ароматических соединений// Журн. физич. химии. 1994. Т.68. № 10. С. 1740–1748.
- [21] Стьюпер Э., Брюггер У., Джурс П. Машинный анализ связи химической структуры и биологической активности. М.: Мир, 1982. 321 с.
- [22] Мак-Глинчи М., Таль Й. Формы кластеров элементов главных подгрупп: топологический подход к счету скелетных электронов/ Химические приложения топологии и теории графов. М.: Мир, 1987. С. 148–165.
- [23] Курбатова С.В., Яшкин С.Н., Соловова Н.В., Колосова Е.А. Использование метода структурной аналогии при исследовании производных адамантана// Нелинейное моделирование и управление. Международ. семинар. Самара, 1998. С. 160–161.
- [24] Зенкевич И.Г. Информационное обеспечение газохроматографической идентификации органических соединений в экоаналитических исследованиях// Журн. аналит. химии. 1996. Т.51. № 11. С. 1140–1148.
- [25] Зенкевич И.Г., Васильев А.В. Сравнительная оценка информативности дополнительных данных при газохроматографической идентификации. Новые возможности использования коэффициентов распределения в системе гексан-ацетонитрил// Журн. аналит. химии. 1993. Т.48. № 3. С. 473–486.
- [26] Курбатова С.В., Яшкин С.Н., Соловова Н.В. Исследование топологии молекулярного поля адамантансодержащих соединений// Нелинейное моделирование и управление. Международ. семинар. Самара, 1998. С. 81–82.
- [27] Журавлева И.Л. Оценка полярности и температур кипения азотсодержащих гетероциклических соединений методом газовой хроматографии// Изв. РАН. Сер. хим. 2000. № 2. С. 323–326.
- [28] Курбатова С.В., Колосова Е.А., Кудряшов С.Ю. Сорбционно-структурные корреляции газо-жидкостной хроматографии производных адамантана// Журн. физич. химии. 1998. Т.72. № 8. С. 1475–1479.
- [29] Бариш М., Яшари Дж. Лалл Р., Шривастава В., Тринайстич Н. Матрица состояний для молекул, содержащих гетероатомы/ Химические приложения топологии и теории графов. М.: Мир, 1987. С. 259–265.
- [30] Кинг Р. Топология связывания в полиэдрических молекулах/ Химические приложения топологии и теории графов. М.: Мир, 1987. С. 116–148.

TOPOLOGY OF ADAMANTANE DERIVATIVES AS POLYHEDRANS

© 2001 Е.А. Kolosova,¹ S.V. Curbatova,² N.V. Solovova,³
E.E. Finkelshtein,⁴ S.N. Yashkin,⁵

Topology of adamantane derivatives is investigated. Connectivity index of these compounds its correlations with different physico-chemical properties are examined.

These investigations estimate the peculiarities of adamantane derivatives intermolecular interactions in gas-liquid chromatography by means of structural parameters. On the base of these correlations chromatographic retention and structure-biological activity relationships of investigated substances may be calculated.

Поступила в редакцию 14/IV/2001;
в окончательном варианте — 5/VI/2001.

¹Kolosova Elena Alexandrovna, Dept. of Chemistry and Chromatography, Samara State University, Samara, 443011, Russia; kolos@ssu.samara.ru

²Curbatova Svetlana Victorovna, Dept. of Chemistry and Chromatography, Samara State University, Samara, 443011, Russia; curbatsv@ssu.samara.ru

³Solovova Nataliya Valentinovna, Dept. of Chemistry and Chromatography, Samara State University, Samara, 443011, Russia; solovova@ssu.samara.ru

⁴Finkelshtein Elena Evgenievna, Dept. of Chemistry and Chromatography, Samara State University, Samara, 443011, Russia

⁵Yashkin Sergey Nikolaevitch, Dept. of Chemistry and Chromatography, Samara State University, Samara, 443011, Russia; yashkin@ssu.samara.ru