

ЛИТЕРАТУРА

1. Пайтген Х., Рихтер П.Х. Красота фракталов. М.: Мир, 1993.
2. Третьяков Ю.Д. Дендриты, фракталы и материалы // Соросовский образовательный журнал, № 11, 1998г., с. 96-102.

УДК 519.173.5:547.022

Студ. П. В. Пашковский,
Науч.рук. канд. физ-мат наук Яроцкая Л.Д.
(кафедра высшей математики, БГТУ)

ГРАФИЧЕСКОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ МОЛЕКУЛ ДЛЯ АНАЛИЗА СВОЙСТВ ВЕЩЕСТВ НА ПРИМЕРЕ БУТАНА, ПЕНТАНА И ИХ ИЗОМЕРОВ

Одной из основных задач органической химии является установление связи между строением вещества и его свойствами. Методы математического моделирования позволяют найти количественные соотношения между структурой и анализируемыми свойствами вещества. В частности, способы описания структуры молекул сводятся к обработке методами теории графов соответствующих им абстрактных математических структур – молекулярных графов.

Целью данной работы является построение молекулярных графов для некоторых алканов и анализ связи между структурой молекул и физико-химическими свойствами посредством топологических индексов.

Граф – сложная геометрическая схема, состоящая из совокупности точек (вершин), соединённых линиями (рёбрами). Связный неориентированный граф, вершинами которого служат атомы углерода, а ребра связями между ними, является молекулярным графом. Если его вершины непомечены, то граф отражает только структуру, а если помечены – структуру и состав. Если рёбра молекулярного графа непомечены, то различия между одинарными и кратными химическими связями нет.

Как математические объекты графы описываются числами, которые в химии называют топологическими индексами. Топологические индексы находят разнообразное применение в структурной химии. В частности, они могут быть использованы для кодирования химической информации, при планировании химического эксперимента в теории электронного строения и реакционной способности молекул, для количественного описания химических структур при анализе связи между структурой молекулы и её свойствами.

Для построения многих топологических индексов используют матрицу расстояний $D = (d_{ij})$, $i, j = 1, \dots, n$, где d_{ij} – минимальное число ребер, которое надо пройти, двигаясь по ребрам графа из i -ой вершины в j -ую. Посредством элементов матрицы расстояний индекс Винера W определяется по формуле

$$W = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n d_{ij}.$$

Статистический анализ углеводородов показал [2], что индекс Винера коррелирует с некоторыми физическими свойствами алканов: молярным объемом, температурами кипения, теплотами испарения и другими. Например, для температуры кипения алканов получена следующая формула:

$$t_0 - t_0^0 = \frac{98(p - p_0)}{p^2} + 5,5 \cdot (p - p_0),$$

где $t_0^0 = 745,42 \cdot \log(p + 4,4) - 689,4$, $p_0 = \frac{1}{6} \cdot (p^3 - p)$, $p_0 = p - 3$,

W – индекс Винера, p – число полярности, t_0 , W_0 , p_0 – те же характеристики нормального алкана, n – число атомов углерода в молекуле.

Другой тип индексов зависит от степеней вершин молекулярного графа. Индекс молекулярной связности или индекс Рандича определяется по формуле:

$$W = \sum (\sigma_i \cdot \sigma_j)^{-\frac{1}{2}},$$

где σ_i – степень i -ой вершины, то есть число ребер, от нее отходящих.

Теплота образования алканов может быть приближенно описана формулой

$$\Delta H_{\text{моль}}^0, \frac{\text{ккал}}{\text{моль}} = 12 \cdot n - 11 \cdot n - 9,$$

где n – число атомов углерода в молекуле.

Построим матрицу расстояний и рассчитаем топологические индексы для двух изомерных углеводородов C_4H_{10} : бутана и его изомера. Для этого изобразим их молекулярные графы и занумеруем вершины в произвольном порядке. Атомы водорода в таких графах не указываются, так как их расположение можно однозначно установить по структуре углеродного скелета. От каждой вершины графа может отходить не более четырех ребер, так как углерод в органических соединениях четырехвалентен. Молекулярные графы для бутана и изобутана имеют следующий вид соответственно:

$$G_1: \begin{array}{cccc} 0 & -0 & -0 & -0 \\ 1 & 2 & 3 & 4 \end{array}, \quad G_2: \begin{array}{ccc} 1 & 2 & 3 \\ 0 & -0 & -0 \\ & |4 & \\ 0 & & \end{array}.$$

Диагональные элементы матрицы расстояний для углеводородов равны 0. В первом графе вершина 1 связана с вершиной 2 одним ребром, поэтому элемент матрицы $d_{12}=1$. Аналогично, $d_{13}=2$, $d_{14}=3$. Полные матрицы расстояний для двух графов

$$D(G_1) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 2 & 3 \\ 1 & 0 & 1 & 2 \\ 2 & 1 & 0 & 1 \\ 3 & 2 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad D(G_2) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 2 & 2 \\ 1 & 0 & 1 & 1 \\ 2 & 1 & 0 & 2 \\ 2 & 1 & 2 & 0 \end{pmatrix}.$$

Для указанных выше графов, соответствующих молекулам $\square_4 \square_{10}$, индекс Винера принимает значения $W(G_1)=10$ и $W(G_2)=9$. Рассчитаем индекс Рандича:

$$\chi(G_1) = \frac{1}{\sqrt{v_1 v_2}} + \frac{1}{\sqrt{v_2 v_3}} + \frac{1}{\sqrt{v_3 v_4}} = \frac{1}{\sqrt{2}} + \frac{1}{\sqrt{2 \cdot 2}} + \frac{1}{\sqrt{2}} = 1,914,$$

$$\chi(G_2) = \frac{1}{\sqrt{v_1 v_2}} + \frac{1}{\sqrt{v_2 v_3}} + \frac{1}{\sqrt{v_2 v_4}} = \frac{1}{\sqrt{1 \cdot 3}} + \frac{1}{\sqrt{1 \cdot 3}} + \frac{1}{\sqrt{1 \cdot 3}} = 1,732.$$

Построим матрицу расстояний и рассчитаем топологические индексы для трех изомерных углеводородов состава C_5H_{12} : пентана, изопентана и неопентана. Их молекулярные графы имеют вид:

$$G_3: \begin{array}{ccccc} 0 & -0 & -0 & -0 & -0 \\ 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \end{array}, \quad G_4: \begin{array}{cccc} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 0 & -0 & -0 & -0 \\ & | & & \\ 0 & 5 & & \end{array}, \quad G_5: \begin{array}{ccc} & 0 & 4 \\ 1 & 2 & | & 3 \\ 0 & -0 & -0 & \\ & | & \\ & 0 & 5 \end{array}.$$

Полные матрицы расстояний для этих графов

$$D(G_3) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 2 & 3 & 4 \\ 1 & 0 & 1 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & 0 & 1 & 2 \\ 3 & 2 & 1 & 0 & 1 \\ 4 & 3 & 2 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad D(G_4) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 2 & 3 & 2 \\ 1 & 0 & 1 & 2 & 1 \\ 2 & 1 & 0 & 1 & 2 \\ 3 & 2 & 1 & 0 & 3 \\ 2 & 1 & 2 & 3 & 0 \end{pmatrix},$$

$$D(G_5) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 2 & 2 & 2 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 2 & 1 & 0 & 2 & 2 \\ 2 & 1 & 2 & 0 & 2 \\ 2 & 1 & 2 & 2 & 0 \end{pmatrix}.$$

Для указанных выше графов, соответствующих пентанам C_5H_{12} , индекс Винера принимает значения $W(G_3)=20$, $W(G_4)=18$ и

$W(G_5)=16$, а индекс Рандича – $\chi(G_3)=2,414$, $\chi(G_4)=2,270$, $\chi(G_5)=2,000$ соответственно.

Таким образом, сравнивая топологические индексы бутана, пентана и их изомеров, мы видим, что с увеличением степени разветвленности углеродного скелета индексы уменьшаются: наибольшие значения соответствуют наименее разветвленным углеводородам. С увеличением длины углеродного скелета топологические индексы увеличиваются, так как в матрице расстояний становится больше элементов. Рассчитав какой-либо топологический индекс, можно описать физико-химические свойства вещества, так как энергия межмолекулярных взаимодействий зависит от корректных оценок размеров молекулы и степени их разветвлённости.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ерёмин В.В. Математика в химии. М.: МЦНМО, 2011. 64 с.
2. Химические приложения топологии и теории графов. Пер. с англ. Под ред. Р. Кинга. М.: Мир, 1987. 560 с.
3. Станкевич М. И., Станкевич И. В., Зефиоров Н. С. Топологические индексы в органической химии // Успехи химии. 1988. Т. 57, вып. 3. С. 337–366.

УДК 51-7:635

Магистрант А.А.Ярошук
Науч. рук. доц. В.В.Игнатенко
(кафедра высшей математики, БГТУ)

ОПТИМАЛЬНОЕ РАСПОЛОЖЕНИЕ РАСТЕНИЙ ПРИ ПОСАДКЕ

В последнее время всё больше земельных площадей отводится для выращивания различных культурных растений. С учётом того, что для этого необходимы очень плодородные почвы, найти эти площади не всегда представляется лёгкой задачей. В связи с этим, следует стремиться к рациональному использованию плодородных площадей. Необходимо использовать их максимально эффективно. Один из приёмов, позволяющих осуществить такое пользование – оптимальное расположение растений.

Под оптимальным расположением растений (при посадке) мы будем понимать такое расположение растений, при котором площадь, занимаемая некоторым количеством растений, будет минимальной и при этом достаточной для их нормального роста и развития. Здесь и далее мы будем рассматривать сплошную посадку без междурядий.