

## MOLEKULÁRIS DESZKRIPTOROK ALKALMAZÁSA OKTÁN IZOMEREK TOPOLÓGIAI SZERKEZETÉNEK JELLEMZÉSÉRE

### APPLICATION OF MOLECULAR DESCRIPTORS IN THE TOPOLOGICAL CHARACTERIZATION OF OCTANE ISOMERS

Réti Tamás<sup>1</sup>, Varga Péter<sup>2</sup>, Réger Mihály<sup>3</sup>

Óbudai Egyetem, Bánki Donát Gépész és Biztonságtechnikai Mérnöki Kar,  
Anyag- és Gyártástudományi Intézet 1081 Budapest, Népszínház utca 8. Telefon:  
+36-1-666-5386

<sup>1</sup>[reti.tamas@bgk.uni-obuda.hu](mailto:reti.tamas@bgk.uni-obuda.hu)

#### Abstract

The finite set of octane isomers is generally used for evaluating and comparing the discriminating performance of various topological descriptors (graph invariants). In this project 9 different graph irregularity indices are investigated, all of them belong to the family of degree-based topological invariants. Using a comparative test on the set of 18 octane isomers, the main results are presented and discussed. By means of regression analysis, we studied the intercorrelations between the irregularity indices and some physicochemical properties. The degree of the intercorrelation was evaluated by correlation coefficients. It has been concluded, that among 9 topological descriptors there are several irregularity indices by which the preselected physicochemical properties of octane isomers can be predicted with a satisfactory accuracy.

**Keywords:** structural chemistry, graph invariants, statistical analysis

#### Összefoglalás

Az oktán izomerek elterjedten használatosak a különféle típusú topológiai deszkriptorok (gráf-invariánsok) diszkriminációs képességének minősítésére és összehasonlítására. Jelen projekt keretében 9 különböző irregularitási indexet vizsgáltunk, ezek a gráfok fokszámai alapján definiált topológiai invariánsok. A 18 oktán izomerrel végzett összehasonlító teszt főbb eredményeit ismertetjük és értékeljük. Regresszió-analízis alkalmazásával elemeztük az irregularitási indexek és egyes fizikai-kémia anyagjellemzők közötti interkorrelációt. Az interkorreláció mértékének számszerű jellemzésére a korrelációs együtthatók szolgáltak. Arra következtettünk, hogy a vizsgált irregularitási indexek között több olyan van, amellyel az oktán izomerek egyes fizikai-kémiai tulajdonsága kielégítő pontossággal előre becsülhető.

**Kulcsszavak:** szerkezeti kémia, gráf invariánsok, statisztikai analízis

#### 1. Bevezetés

A szerkezeti kémiában általános törekvés a szerves vegyületek szerkezete és ezek

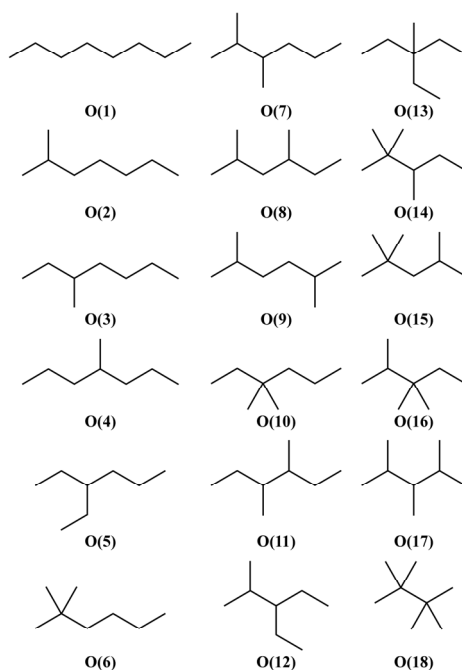
fizikai-kémiai tulajdonságai közötti összefüggések kvantitatív kritériumon alapuló leírása. A szerves vegyületek között a legegyszerűbb szerkezetűek a szénhidro-

gének, ennek tulajdonítható, hogy tulajdonságaik predikciójára elterjedten használatosak a gráfelméleten alapuló eljárások [1,2]. Ezek közös sajátossága, hogy adott n-számú karbon atomot tartalmazó szénhidrogén-vegyületet egy n csúcspontú gráffal modellezik, a gráf szerkezetének számszerű jellemzésére ún. topológiai invariánsokat (molekuláris topológiai deszkritorokat) használnak. Jelen kutatási projekt keretében azt vizsgáltuk, hogy a topológiai invariánsok egy speciális osztályának tekintett „gráf-irregularitási indexek” milyen hatékonysággal alkalmazhatók a mindössze 8 karbon atomot tartalmazó ún. oktán-izomerek egyes fizikai-kémiai tulajdonságainak becslésére, predikciójára.

## 2. Irregularitási indexek származtatása

Vizsgálatinkat n csúcsszámú és m élszámú összefüggő gráfokra korlátoztuk, ahol V illetve E a gráf csúcsainak illetve éleinek halmazát jelöli. A szokásos terminológiát használva,  $d_u$  a gráf egy tetszőleges u csúcsának fokszáma, és uv pedig a gráfnak két szomszédos, u és v csúcsait összekötő éle. Definíció szerint egy gráf reguláris, ha minden egyes csúcsának fokszáma azonos, és irreguláris, ha léteznek különböző fokszámú csúcsai.

Gráfok strukturális inhomogenitásának kvantitatív jellemzésére elterjedten használatosak a különféle típusú irregularitási indexek. Egy G gráf  $Irr(G)$  topológiai invariánsát a gráf irregularitási indexének szokás nevezni, ha  $Irr(G) \geq 0$ , és  $Irr(G)=0$  akkor és csak akkor, ha a gráf reguláris [3]. Az oktán izomereknek pontosan 18 különböző változata ismert, következésképpen ezekhez 18 különböző (nem izomorf) gráf rendelhető. (1. ábra). Ezek mindegyike nem-reguláris gráf.



1. ábra. Oktán-izomerek gráfjai

Az oktán izomereket reprezentáló gráfok a fa-gráfok családjába tartoznak, következésképpen  $n=8$  csúcsot és  $m=7$  élet tartalmaznak. E gráfok strukturális jellemzésére, 9 különböző irregularitási indexet választottunk ki, definiálásukra az alábbi képletek szolgáltak:

$$IR1(G) = \sum_{u \in V} d_u^3 - \frac{2m}{n} \sum_{u \in V} d_u^2$$

$$IR2(G) = \sqrt{\frac{\sum_{uv \in E} d_u d_v}{m}} - \frac{2m}{n}$$

$$IRF(G) = \sum_{uv \in E} (d_u - d_v)^2$$

$$IRA(G) = \sum_{uv \in E} (d_u^{-1/2} - d_v^{-1/2})^2$$

$$IRB(G) = \sum_{uv \in E} (d_u^{1/2} - d_v^{1/2})^2$$

$$IRC(G) = \frac{\sum_{uv \in E} \sqrt{d_u d_v}}{m} - \frac{2m}{n}$$

$$\text{IRDIF}(G) = \sum_{uv \in E} \left| \frac{d_u}{d_v} - \frac{d_v}{d_u} \right|$$

$$\text{AL}(G) = \sum_{uv \in E} |d_u - d_v|$$

$$\text{IRL}(G) = \ln \prod_{uv \in E} \left\{ \frac{\max(d_u, d_v)}{\min(d_u, d_v)} \right\}$$

### 3. Korrelációs vizsgálatok eredményei

Vizsgálataink alapvetően annak tisztázására irányultak, hogy a fentebb definiált irregularitási indexek milyen hatékonysággal alkalmazhatók az oktán izomerek bizonyos fizikai-kémiai tulajdonságainak predikciójára. Erre a célra a leginkább kézen fekvő módszerek a lineáris, egyváltozós korreláció-analízisen alapuló statisztikai módszer kínálkozott. Kilenc irregularitási index felhasználásával három kiválasztott anyagtulajdonságra vonatkozóan, (nevezetesen a forráspont (Bp), a párolgási standard entalpia (DhVAP) valamint az entrópia (Entrópia)) végeztünk összehasonlító korreláció-elemzést. A korrelációs együtthatók (R) előjeles számértékeit az **1. táblázat** összesíti. A táblázatban a becült korrelációs együtthatók közül számszerűen csak azokat tüntettük fel, amelynek abszolút értéke 0,8-nál nagyobbra adódott.

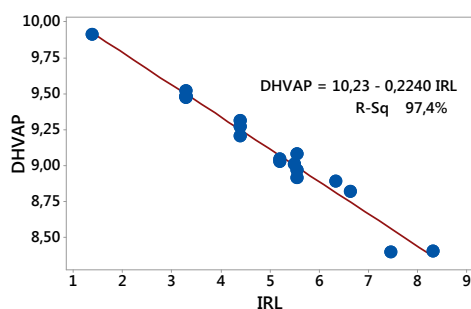
**1. táblázat.** Korrelációs tényezők (R) számított értékei

Index	Bp	DhVAP	Entrópia
IR1	–	-0,919	-0,951
IR2	–	-0,818	-0,936
IRF	–	-0,938	-0,907
IRA	-0,820	-0,958	-0,906
IRB	-0,805	-0,953	-0,912
IRC	–	-0,881	-0,954
IRDIF	-0,830	-0,939	-0,863
AL	-0,816	-0,976	-0,897
IRL	-0,837	-0,987	-0,898

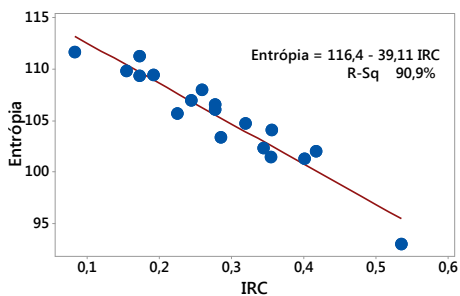
### 4. Következtetések

Az eredményeket értékelve az alábbi következtésekre juthatunk:

- Az oktán izomerek forráspontjának (Bp) predikciója lineáris regresszióval származtatott egyenletekkel kevésbé sikeres. A legjobb esetben is a korrelációs együttható értéke csak  $R = -0,837$  adódott, ezt az értéket az IRL irregularitási index felhasználásával lehetett elérni. A szakirodalomban több helyen is utalnak arra, hogy a Bp forráspont előrejelzése tűnik a leginkább problematikusnak a vizsgált fizikai-kémiai tulajdonságok között.
- Ami a párolgási standard entalpia (DhVAP) predikcióját illeti, mint megállapítható, többféle irregularitási index alkalmazása is kielégítő eredményhez vezet. Ezek között a predikció hatékonyságát tekintve a legjobb az IRL index, amelyre vonatkozóan  $R = -0,987$ .
- Hasonlóan ígéretes eredményeket kaptunk az Entrópia becslésekor. Ez esetben a legjobb predikciót az IRC index szolgáltatta, ezt a megállapítást egyértelműen alátámasztja a  $R = -0,954$  korrelációs tényező kimagasló értéke.



**2. ábra.** Az IRL irregularitási index és a DhVAP anyagjellemző közötti összefüggés



3. ábra. Az IRC irregularitási index és az Entrópia közötti összefüggés

A korrelációs vizsgálatok leginkább relevánsnak tekinthető eredményeit a DHVAP és az Entrópia tulajdonságokra vonatkozóan 2. és 3. ábrák diagramjai szemléltetik.

### Szakirodalmi hivatkozások

- [1] R. Todeschini, V. Consonni, *Handbook of Molecular Descriptors*, 2nd ed., Wiley-VCH, Weinheim, 2009.
- [2] I. Gutman, *Degree-Based Topological Indices*, *Croat. Chem. Acta*, 86, 2013, 351-361.
- [3] T. Réti, E. Tóth-Laufer, *On the construction and comparison of graph irregularity indices*, *Kragujevac J. Sci.* 39 (2017) 66-88.