

УДК 544.169

РАСЧЕТ И СВОЙСТВА КОРРЕЛЯЦИОННОЙ РАЗМЕРНОСТИ АЛКАНОВ НА ОСНОВЕ КРИВЫХ МОЛЕКУЛЯРНОГО РАССЕЯНИЯ

Л.Д. Григорьева^{1*}, В.Ю. Григорьев²

(¹Факультет фундаментальной физико-химической инженерии МГУ имени М.В. Ломоносова, ²Институт физиологически активных веществ РАН; *e-mail: ldg@physchem.msu.ru)

На основе кривых молекулярного рассеяния рассчитаны величины корреляционной размерности (D_2) в ряду n -алканов $C_2H_6...C_{40}H_{82}$. Установлено, что значения D_2 варьируют в пределах 1,10–1,22. При увеличении числа атомов наблюдается рост корреляционной размерности, а затем ее стабилизация. Исследовано влияние замены атомов водорода на атомы галогенов, а также изменение степени гибридизации атомов углерода на величины D_2 . Выявлена связь корреляционной размерности с другими фрактальными характеристиками молекул.

Ключевые слова: корреляционная размерность, алканы, молекулярное рассеяние.

Идеи и методы нелинейной динамики и теории хаоса находят широкое применение в разных областях: физике [1, 2], биологии [3, 4], экономике [5, 6], технике [7, 8], компьютерных вычислениях [9, 10, 11], социологии [12]. В области химии также известны работы по этой тематике [13, 14], например изучение хаотического характера колебательной реакции Белоусова–Жаботинского [15], исследование гетерогенных поверхностей на основе фрактальной геометрии [16], анализ паттернов Тьюринга [17].

Одним из объектов исследований служат временные (пространственные) ряды данных, получаемые на основе экспериментальных наблюдений и теоретических расчетов. Широкому вовлечению этих данных в исследовательский процесс послужило появление работы [18], согласно которой основные инварианты динамической системы могут быть оценены путем реконструкции фазового пространства на основе анализа имеющегося ряда данных. При этом ключевое значение имеют два фактора: размерность вложения и величина задержки. Среди инвариантов большое распространение получила корреляционная размерность (D_2) аттрактора системы в связи с появлением быстрого алгоритма расчета [19]. С теоретической точки зрения, корреляционная размерность, связанная с числом независимых переменных, которые необходимы для описания динамической системы, характеризует фрактальную размерность аттрактора. К настоящему времени накоплен достаточно обширный материал, связанный с величинами D_2 . На основе изучения

этих данных можно решать теоретические и практические задачи: устанавливать причинно-следственные связи в динамических системах [20], анализировать электрокардиограммы [21] и вариабельность частоты сердечных сокращений [22], исследовать лазерные системы [23], оценивать структуру пористых органических гелей [24] и т.д.

Для изучения структуры вещества в разных агрегатных состояниях широко используются дифракционные методы, такие как рентгеновская дифракция, нейтронография и электронография. В их основе лежит одна и та же геометрическая теория дифракции, но физическая природа взаимодействия с веществом различна. Важной количественной характеристикой дифракционных экспериментов служит структурный фактор, который используется, например, для определения фрактальных свойств объектов [25]. В случае газовой электронографии [26] ключевую роль при расчете геометрической структуры играет молекулярное рассеяние $M(s)$, представляющее собой функцию от расстояний между парами атомов и зависящее от их типа, угла рассеяния и длины волны электронов.

Одна из фундаментальных проблем химии – связь между структурой и свойством. В прикладных исследованиях, посвященных изучению этого вопроса, широкое распространение получили подходы, основанные на методологии количественной связи структура – активность (QSAR). Одним из элементов этих подходов является описание структуры химических соединений в виде

матрицы различных физико-химических, топологических, электронных и других количественных характеристик (дескрипторов). В частности, для описания трехмерной структуры соединений нашло применение и молекулярное рассеяние [27–29] как дискретный набор величин $M(s)$, рассчитанных с определенным шагом. Учитывая сложность молекулярной структуры, можно утверждать, что поиск новых дескрипторов с различной информацией представляет собой весьма актуальную задачу [30].

Цель настоящего исследования состояла в расчете и анализе новых молекулярных дескрипторов – корреляционных размерностей, полученных на основе пространственных рядов данных молекулярного рассеяния в ряду алканов.

Расчет корреляционной размерности

Для расчета геометрической структуры исследуемых соединений использовали компьютерную программу HyperChem [31] со следующими параметрами: полуэмпирический метод AM1, полная оптимизация, $RMS = 0,1$ ккал/(Å мол). Рассматривая в качестве приближения сферическую симметрию атомов и не учитывая внутримолекулярные колебания, молекулярную составляющую рассеяния электронов на молекулах можно описать в виде модифицированной формулы [27, 28, 32]:

$$M(s) = \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N C_{ij} \frac{\sin sr_{ij}}{sr_{ij}}, \quad (1)$$

где s – угловой параметр:

$$s = \frac{4\pi}{\lambda} \sin \frac{\Theta}{2},$$

где λ – длина волны электронов, Θ – угол рассеяния, r_{ij} – межатомное расстояние, C_{ij} – коэффициент, характеризующий рассеивающую способность пары атомов:

$$C_{ij} = \frac{Z_i Z_j}{\sum_{k=1}^N (Z_k^2 + Z_k)}, \quad (2)$$

где Z_i – порядковый номер i -го атома. При этом важно отметить, что коэффициент C_{ij} имеет практически постоянное значение во всей шкале s . При определении шага расчета $M(s)$ исследовали интервал $\Delta s = 0,001$ – $0,1$ Å⁻¹ и остановились на величине $\Delta s = 0,01$ Å⁻¹, при которой в достаточной мере выражена область скейлинга. В качестве начальной точки использовали $s_{\min} = 0,01$ Å⁻¹. Учитывая, что при практическом применении $M(s)$

максимальная величина $s_{\max} = 40$ – 45 Å⁻¹, расчет ограничивали величиной $s_{\max} = 40$ Å⁻¹. При этом общий размер ряда составил 4000 отсчетов.

На рис. 1 представлен пример расчета значений $M(s)$ для молекулы пентана. Максимальная величина $M(s) = 3,3585$ при $s = 0,01$ Å⁻¹. Для лучшего представления характера поведения на рис. 1 показаны только те точки, у которых $M(s) \leq 0,4$.

В работе использовали алгоритм вычисления корреляционной размерности D_2 для $M(s)$, который может быть представлен в виде определенной последовательности шагов.

1. Нормирование величины $M(s)$ на основе формулы: $Y_i = 1 - (X_{\max} - X_i)/(X_{\max} - X_{\min})$, где X_i , X_{\max} , X_{\min} – текущее, максимальное, минимальное значение $M(s)$ соответственно, Y_i – нормированная (0–1) величина $M(s)$.

2. Определение величины задержки τ с использованием первого значения, при котором автокорреляционная функция (ACF) полученного ряда достигает 0.

3. Расчет минимальной величины пространства вложения m с применением метода, предложенного в работе [33].

4. Определение корреляционного интеграла $C(\epsilon)$ на основе алгоритма Grassberger–Procaccia [19] (программа c2naive, [34, 35]) с использованием величин τ и m .

5. Определение в координатах $\log(C(\epsilon)) - \log(\epsilon)$ прямолинейного участка и расчет для него углового коэффициента (D_2) из регрессионного уравнения $\log(C(\epsilon)) = \text{const} + D_2 \log(\epsilon)$. Для этого использовали два метода. В первом методе (I) проводили анализ графиков Раппа [36] (зависимость $\log(\Delta C(\epsilon)/\Delta(\epsilon))$ от $\log(\Delta(\epsilon))$) в интервале $0,00005 \leq \epsilon \leq 0,005$ и конструировали ряд, состоящий из ≥ 5 последовательных точек, имеющих коэффициент вариации (V_C) не более 0,1. Пример расчета приведен на рис. 2. Наиболее прямолинейный участок во втором методе (II) определяли на основе максимальных величин FIT [37] (модифицированный критерий Фишера) регрессионных уравнений с минимальным числом точек ≥ 5 в том же интервале величин ϵ , что и в первом методе.

6. Увеличение величины m на единицу и повторение п.п. 4, 5 до достижения величины $m + 3$.

7. Расчет среднего значения D_2 .

Динамические модельные ряды данных генерировали с использованием компьютерного пакета TISEAN [34]. Регрессионную модель конструировали на основе программы SVD [38]. Для описательной статистики использовали: N – число точек, R^2 – квадрат коэффициента линейной

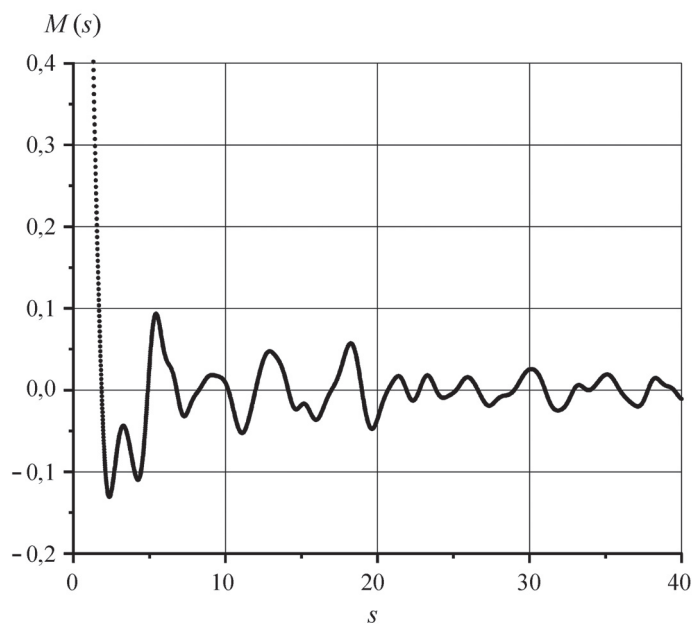


Рис. 1. Кривая молекулярного рассеяния пентана

корреляции, s – среднеквадратичное отклонение; Δ – стандартная ошибка.

Результаты и их обсуждение

В целях выяснения работоспособности описанного выше алгоритма вычисления корреляционной размерности были проведены расчеты для некоторых динамических моделей (табл. 1). В случае известных хаотических систем наблюдается удовлетворительное соответствие между рассчитанными и приводимыми в литературе

данными. С учетом того, что в основе расчета $M(s)$ лежит функция синус, были также оценены величины корреляционной размерности для этой модели. При этом можно отметить, что величина D_2 ($1,01 \pm 0,01$), рассчитанная на основе методов (I) и (II), оказалась близкой к теоретическому значению (1,00).

В табл. 2 и на рис. 3 представлены результаты расчетов корреляционной размерности ряда n -алканов. Из представленных данных следует, что величина D_2 растет с увеличением молекулярной массы. Однако после пентадекана ($C_{15}H_{32}$) она достигает своего максимума в интервале 1,20–1,22 и дальше не увеличивается.

В какой-то степени наблюдаемое явление можно объяснить исходя из следующих соображений. Молекулярное рассеяние представляет собой сумму рассеяний на отдельных парах атомов (1). Расчеты показывают, что величина D_2 для данных, полученных на основе функции $\sin(sr)/sr$, при увеличении расстояния между атомами r сначала растет, а затем стабилизируется (рис. 4), что, вероятно, и приводит к наблюдаемому поведению величин корреляционной размерности в гомологическом ряду алканов.

Выявленная стабилизация величин корреляционной размерности согласуется с данными [41], где установлено, что в гомологическом ряду алканов $C_{10}H_{22} \dots C_{22}H_{46}$ экспонента Херста (H) (фрактальная величина, характеризующая «память» в рядах данных) мало меняется и может быть оценена средним значением $H = 0,70$. Отметим, что встречаются данные и о симбатном изменении ве-

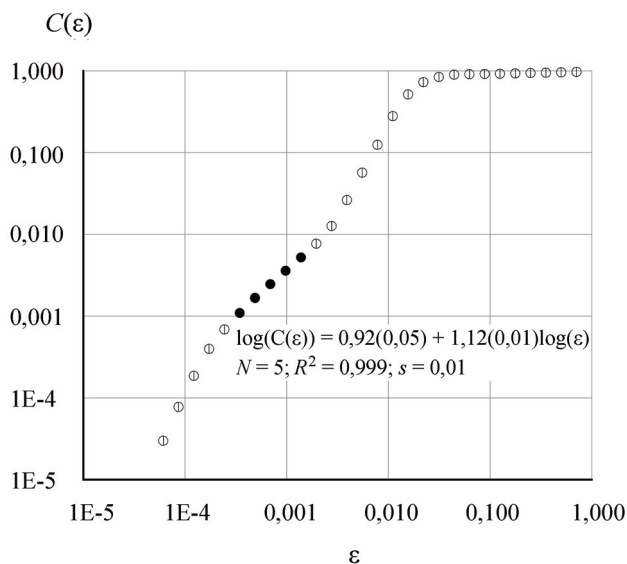


Рис. 2. Корреляционный интеграл молекулярного рассеяния пентана при $m = 5$. Черным цветом отмечены точки, которые были использованы для расчета корреляционной размерности

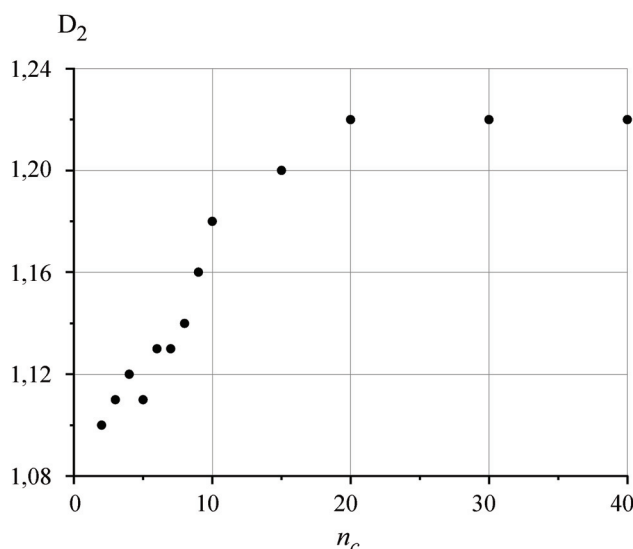


Рис. 3. Зависимость корреляционной размерности от числа атомов углерода в ряду алканов

личин D_2 и H , например данные, полученные при исследовании электроэнцефалограмм [42].

Как следует из формулы (1), величина молекулярного рассеяния зависит не только от межатомных расстояний, но и от типа атомов. При замене атомов водорода на более тяжелые атомы галогенов (F, Cl, Br) наблюдается увеличение величин корреляционной размерности. Так, в ряду замещенных пентанов $R-(CH_2)_3-CH_3$, где $R = CH_3$; $R = CF_3$; $R = CCl_3$; $R = CBr_3$; $D_2 = 1,11 \pm 0,02$; $D_2 = 1,13 \pm 0,02$; $D_2 = 1,22 \pm 0,05$; $D_2 = 1,32 \pm 0,03$ соответственно. Ранее в работе [43] было предложено оценивать структурные фрактальные свойства молекул с помощью фрактальных размерностей четырех типов: D_{tot} , D_{val} , D_{vdw} и D_{unb} , рассчитанных на основе всех атомов в молекуле, валентно связанных атомов, атомов, находящихся в ван-дер-ваальсовом контакте и несвязанных атомов. Используя один из типов

(D_{unb}), мы рассчитали фрактальную размерность для рассмотренного выше ряда молекул. Она составила $D_{unb} = 1,09 \pm 0,02$; $D_{unb} = 1,12 \pm 0,01$; $D_{unb} = 1,16 \pm 0,02$ и $D_{unb} = 1,22 \pm 0,02$ соответственно. Очевидно, что обнаруженная корреляция величин D_2 и D_{unb} не случайна. Она отражает тот факт, что корреляционная размерность является фрактальной величиной, характеризующей степень сложности объекта [20].

Одна из фундаментальных задач химии – исследование связи между структурой молекул и проявляемыми ими свойствами. Органическая химия предоставляет большие возможности для трансформации структур соединений, в частности, путем изменения степени гибридизации атомов углерода. Величина корреляционной размерности оказывается чувствительной к такому изменению структуры. Так, для гексана $D_2 = 1,13 \pm 0,01$, для 1-гексена $D_2 = 1,15 \pm 0,02$, для

Т а б л и ц а 1

Величины задержки (τ), пространства вложения (m) и корреляционной размерности ($D_2 \pm \Delta$), рассчитанной на основе двух методов (I, II), для модельных динамических рядов ($n = 4000$),

Модель	τ	m	$D_2 \pm \Delta$ (I)	$D_2 \pm \Delta$ (II)	D_2 [лит.]
Henon, $a = 1,4$; $b = 0,3$	1	2–5	$1,24 \pm 0,02$	$1,24 \pm 0,01$	$1,220 \pm 0,036$ [39]
Ikeda, $a = 0,4$; $b = 6,0$; $c = 0,9$	1	4–7	$1,65 \pm 0,05^*$	$1,63 \pm 0,08^*$	1,616 [40]
Lorenz, $r = 28$; $s = 10$; $b = 8/3$	19	3–6	$2,09 \pm 0,06^{**}$	$2,09 \pm 0,06^{**}$	$2,049 \pm 0,096$ [39]
Sin(x), $\Delta x = 0,01$	159	2–5	$1,01 \pm 0,01^{***}$	$1,01 \pm 0,01^{***}$	–

* $0,001 \leq \varepsilon \leq 0,1$; ** $0,008 \leq \varepsilon \leq 0,08$; $V_c < 0,25$; *** $0,005 \leq \varepsilon \leq 0,2$.

Т а б л и ц а 2

Величины задержки (τ), пространства вложения (m) и корреляционной размерности ($D_2 \pm \Delta$), рассчитанной на основе двух методов (I, II), а также их среднее значение ($D_2 \pm s$) для ряда n -алканов

Молекула	τ	m	$D_2 \pm \Delta$ (I)	$D_2 \pm \Delta$ (II)	$D_2 \pm s$
C_2H_6	166	4–7	$1,10 \pm 0,02$	$1,10 \pm 0,02$	$1,10 \pm 0,02$
C_3H_8	153	4–7	$1,12 \pm 0,04$	$1,10 \pm 0,03$	$1,11 \pm 0,03$
C_4H_{10}	151	4–7	$1,12 \pm 0,02$	$1,12 \pm 0,03$	$1,12 \pm 0,02$
C_5H_{12}	150	4–7	$1,12 \pm 0,03$	$1,10 \pm 0,02$	$1,11 \pm 0,02$
C_6H_{14}	150	4–7	$1,14 \pm 0,01$	$1,12 \pm 0,02$	$1,13 \pm 0,01$
C_7H_{16}	150	4–7	$1,13 \pm 0,02$	$1,12 \pm 0,02$	$1,13 \pm 0,02$
C_8H_{18}	150	4–7	$1,15 \pm 0,04$	$1,13 \pm 0,03$	$1,14 \pm 0,03$
C_9H_{20}	150	4–7	$1,16 \pm 0,03$	$1,15 \pm 0,02$	$1,16 \pm 0,02$
$C_{10}H_{22}$	151	4–7	$1,18 \pm 0,04$	$1,17 \pm 0,04$	$1,18 \pm 0,04$
$C_{15}H_{32}$	153	4–7	$1,21 \pm 0,05$	$1,18 \pm 0,03$	$1,20 \pm 0,04$
$C_{20}H_{42}$	154	4–7	$1,22 \pm 0,03$	$1,22 \pm 0,01$	$1,22 \pm 0,02$
$C_{30}H_{62}$	156	4–7	$1,22 \pm 0,01$	$1,22 \pm 0,01$	$1,22 \pm 0,01$
$C_{40}H_{82}$	157	4–7	$1,23 \pm 0,01$	$1,20 \pm 0,04$	$1,22 \pm 0,02$

1-гексина $D_2 = 1,17 \pm 0,01$, т.е. корреляционная размерность соединений увеличивается при изменении гибридизации в ряду:

$$Csp > Csp2 > Csp3.$$

Таким же образом меняется и фрактальная размерность D_{tot} :

$$1,20(sp) > 1,19(sp2) > 1,11(sp3).$$

Таким образом, в работе с использованием комплексного подхода, включающего в себя оценку величины задержки и минимального пространства вложения, проведена реконструкция фазового пространства и рассчитаны корреляционные размерности для ряда n -алканов $C_2H_6 \dots C_{40}H_{82}$ на основе кривых молекулярного рассеяния. Установлено, что в гомологическом ряду алканов с ростом числа атомов величина D_2 сначала увеличивается, а затем происходит стабилизация значений. На примере замещения части атомов водорода в пентане на более тяжелые атомы галогенов продемонстрировано увеличение корреляционной размерности в ряду $Br > Cl > F > H$. Изменение степени гибридизации атомов углерода в ряду соединений гексан, 1-гексен, 1-гексин сопровождается ростом значений D_2 . Выявлено существование связи между корреляционной размерностью и другими известными фрактальными размерностями молекул. Полученные результаты свидетельствуют о том, что величину D_2 можно

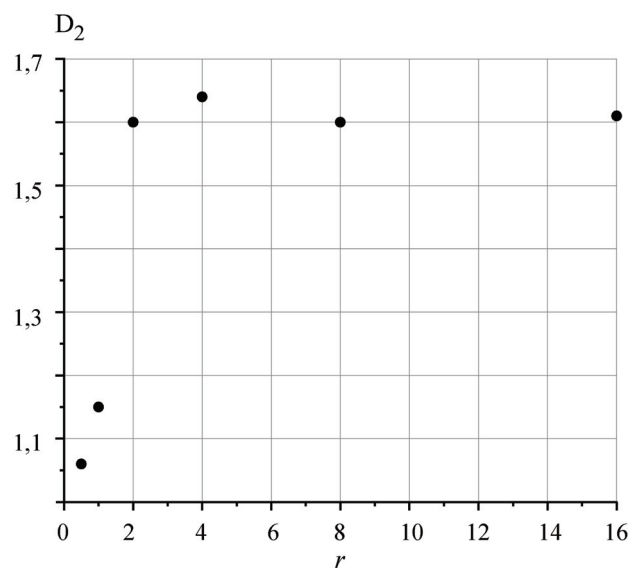


Рис. 4. Зависимость корреляционной размерности от межатомного расстояния для модельных данных на основе функции $\sin(sr)/sr$

рассматривать в качестве новой фрактальной молекулярной характеристики (дескриптора), которая может оказаться полезной при исследовании связи структура – активность.

Работа выполнена в рамках Государственного задания Института физиологически активных веществ Российской Академии наук 2020 года (тема № 0090-2020-0004).

Конфликта интересов нет.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Li N., Susanto H., Cemlyn B.R., Henning I.D., Adams M.J. // Opt. Express. 2018. Vol. 26. P. 4751 (DOI: <https://doi.org/10.1364/OE.26.004751>).
2. Mahmoud E.E., Higazy M., Al-Harhi T.M. // Mathematics. 2019. Vol. 7. P. 877 (DOI: <https://doi.org/10.3390/math7100877>).
3. Pillai N., Schwartz S.L., Ho T., Dokoumetzidis A., Bies R., Freedman I. // J. Pharmacokinet. Pharmacodyn. 2019. Vol. 46. P. 193 (DOI: <https://doi.org/10.1007/s10928-019-09629-4>).
4. Toker D., Sommer F.T., D'Esposito M. // Commun. Biol. 2020. Vol. 3. 11 (DOI: <https://doi.org/10.1038/s42003-019-0715-9>).
5. Zhang X., Zhu H. // Complexity. 2019. Vol. 2019. 6715036 (DOI: <https://doi.org/10.1155/2019/6715036>).
6. Tănăsie A., Drăcea R., Lădaru G.R. // Sustainability. 2017. Vol. 9. P. 2355 (DOI: <https://doi.org/10.3390/su912235>).
7. McMahon C.J., Toomey J.P., Kane D.M. // PLoS ONE. 2017. Vol. 12. e0181559 (DOI: <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0181559>).
8. Navarro-Urrios D., Capuj N.E., Colombano M.F., Garcia P.D., Sledzinska M., Alzina F., Griol A., Martinez A., Sotomayor-Torres C.M. // Nat. Commun. 2017. Vol. 8. 14965 (DOI: <https://doi.org/10.1038/ncomms14965>).
9. Kia B., Lindner J.F., Ditto W.L. // Phil. Trans. R. Soc. 2017. Vol. A375. 20160222 (DOI: <https://doi.org/10.1098/rsta.2016.0222>).
10. Boeing G. // Systems. 2016. Vol. 4. P. 37 (DOI: <https://doi.org/10.3390/systems404003>).
11. Binous H., Ahmed Bellagi A. Comput. Appl. Eng. Educ. 2019. Vol. 27. P. 217 (DOI: <https://doi.org/10.1002/cae.22070>).
12. Chen Y., Wang Y., Li X. // Chaos Soliton Fract. 2019. Vol. 126. P. 122 (DOI: <https://doi.org/10.1016/j.chaos.2019.05.029>).
13. Showalter K., Epstein I.R. // Chaos. 2015. Vol. 25. 097613 (DOI: <https://doi.org/10.1063/1.4918601>).
14. Cramer J.A., Booksh K.S. // J. Chemom. 2006. Vol. 20. P. 447 (DOI: <https://doi.org/10.1002/cem.1003>).
15. Hudson J.L., Mankin J.C. // J. Chem. Phys. 1981. Vol. 74. P. 6171 (DOI: <https://doi.org/10.1063/1.441007>).
16. Pfeifer P., Anvir D. // J. Chem. Phys. 1983. Vol. 79. P. 3558 (DOI: <https://doi.org/10.1063/1.446210>).
17. Konow C., Somberg N.H., Chavez J., Epstein I.R., Dolnik M. // Phys. Chem. Chem. Phys. 2019. Vol. 21. P. 6718 (DOI: <https://doi.org/10.1039/C8CP07797E>).
18. Takens F. Detecting strange attractors in turbulence. In: Rand D., Young L.S. (eds). Dynamical Systems and Turbulence. Warwick 1980. Lecture Notes in Mathematics. Vol. 898. P. 366. Springer, Berlin, Heidelberg, 1981 (DOI: <https://doi.org/10.1007/BFb0091924>).
19. Grassberger P., Procaccia I. // Phys. Rev. Lett. 1983. Vol. 50. N 5. P. 346 (DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.50.346>).
20. Krakovská A. // Entropy. 2019. Vol. 21. P. 818 (DOI: <https://doi.org/10.3390/e21090818>).
21. Nayak S.K., Bit A., Dey A., Mohapatra B., Pal K. // J. Healthc. Eng. 2018. Vol. 2018. ID 6920420 (DOI: <https://doi.org/10.1155/2018/6920420>).
22. Bolea J., Laguna P., Remartínez J.M., Rovira E., Navarro A., Bailón R. // Comput. Math. Methods. Med. 2014. Vol. 2014. 129248 (DOI: <https://doi.org/10.1155/2014/129248>).
23. McMahon C.J., Toomey J.P., Kane D.M. // PLoS ONE. 2017. Vol. 12. e0181559 (DOI: <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0181559>).
24. Prostedny M., Fletcher A., Mulheran P. // RSC Adv. 2019. Vol. 9. P. 20065 (DOI: <https://doi.org/10.1039/C9RA01979K>).
25. Anitas E.M. // Nanomaterials. 2019. Vol. 9. P. 648 (DOI: <https://doi.org/10.3390/nano9040648>).
26. Вилков Л.В., Анашкин М.Г., Засорин Е.З., Мастрюков В.С., Спиридонов В.П., Садова Н.И. Теоретические основы газовой электронографии. М., 1974.
27. Soltzberg L.J., Wilkins C.L. // J. Am. Chem. Soc. 1977. Vol. 99. P. 439 (DOI: <https://doi.org/10.1021/ja00444a021>).
28. Novikov V.P., Raevskii O.A. // Pharm. Chem. J. 1982. Vol. 16. P. 379 (DOI: <https://doi.org/10.1007/BF00762059>).
29. Schuur J.H., Selzer P., Gasteiger J. // J. Chem. Inf. Comput. Sci. 1996. Vol. 36. P. 334 (DOI: <https://doi.org/10.1021/ci950164c>).
30. Muratov E.N., Bajorath J., Sheridan R.P., Tetko I.V., Filimonov D., Poroikov V., Oprea T.I., Baskin I.I., Varnek A., Roitberg A., Isayev O., Curtalolo S., Fourches D., Cohen Y., Aspuru-Guzik A., Winkler D.A., Agrafiotis D., Cherkasov A. and Tropsha A. // Chem. Soc. Rev. 2020. Vol. 49. P. 3525 (DOI: <https://doi.org/10.1039/d0cs00098a>).
31. (URL: <http://www.hyper.com/>).
32. Wierl K. // Ann. Phys. (Leipzig). 1931. Vol. 8. P. 521.
33. Cao L. // Physica D. 1997. Vol. 110. P. 43 (DOI: [https://doi.org/10.1016/S0167-2789\(97\)00118-8](https://doi.org/10.1016/S0167-2789(97)00118-8)).
34. (URL: https://www.pks.mpg.de/~tisean/Tisean_3.0.1/index.htm/).
35. Hegger R., Kantz H., Schreiber T. // Chaos. 1999. Vol. 9. P. 413 (DOI: <https://doi.org/10.1063/1.166424>).
36. Albano A.M., Mees A.I., de Guzman G.C., Rapp P.E. Data requirements for reliable estimation of correlation dimension / H. Degn, A.V. Holden and L.F. Olsen (Eds.), Chaos in Biological Systems. Plenum Publishing. N.Y., 1987. P. 207.
37. Kubinyi H. // Quant.-Struct.-Act. Relat. 1994. Vol. 13. P. 393 (DOI: <https://doi.org/10.1002/qsar.19940130403>).
38. Forsythe G.E., Malcolm M.A., Moler C.B. Computer Methods for Mathematical Computations. Prentice-Hall, 1977.
39. Sprott J.C., Rowlands G. // IJBC. 2001. Vol. 11. P. 1865 (DOI: <https://doi.org/10.1142/S021812740100305X>).
40. Saha L.M., Prasad S., Mohanty R.K. // Appl. Math. Sci. 2012. Vol. 6. P. 4197.
41. Grigorev V.Yu., Grigoreva L.D. // Moscow Univ. Chem. Bull. 2017. Vol. 72. N 3. P. 144 (DOI: <https://doi.org/10.3103/S0027131417030026>).
42. Geng S., Zhou W., Yuan Q., Cai D., Zeng Y. // Neurol. Res. 2011. Vol. 33. P. 908 (DOI: <https://doi.org/10.1179/1743132811Y.0000000041>).
43. Grigorev V.Yu., Grigoreva L.D. // Moscow Univ. Chem. Bull. 2016. Vol. 71. N 3. P. 199 (DOI: <https://doi.org/10.3103/S0027131416030056>).

Поступила в редакцию 10.05.2020
 Получена после доработки 12.05.2020
 Принята к публикации 20.05.2020

CALCULATION AND PROPERTIES OF THE CORRELATION DIMENSION OF ALKANES BASED ON MOLECULAR SCATTERING CURVES

L.D. Grigoreva^{1*}, V.Y. Grigorev²

(¹Department of Fundamental Physical and Chemical Engineering, Moscow State University, ²Institute of Physiologically Active Compounds, Russian Academy of Sciences; *e-mail: ldg@physchem.msu.ru)

For a series of n-alkanes $C_2H_6 \dots C_{40}H_{82}$ was calculated the correlation dimension (D_2) on the basis of molecular scattering curves. It was found that D_2 varies in the range 1.10–1.22. By increasing the total number of atoms correlation dimension increases and then stabilizes. The effect of the replacement of hydrogen atoms by halogen atoms, as well as the change in the degree of hybridization of carbon atoms by D_2 , was studied. A correlation dimension has been identified with other fractal characteristics of the molecules.

Key words: correlation dimension, alkanes, molecular scattering.

Сведения об авторах: Григорьева Людмила Дмитриевна – доцент факультета фундаментальной физико-химической инженерии МГУ имени М.В. Ломоносова, канд. физ.-матем. наук (ldg@physchem.msu.ru); Григорьев Вениамин Юрьевич – вед. науч. сотр. отдела компьютерного молекулярного дизайна ИФАВ РАН, докт. хим. наук (beng@ipac.ac.ru).