

直链烷烃取代衍生物 Wiener 指数的简便计算方法*

丁伟 刘先军 于涛 吴文祥¹ 刘娜 张艳秋(大庆石油学院 化学化工学院; ¹大庆石油学院 石油工程学院, 大庆 163318)

摘要 根据直链烷烃衍生物分子拓扑结构的特点, 将直链烷烃衍生物拆分为由直链单元和取代基团几个部分构成, 再根据每部分的拓扑结构特点给出相应的计算公式. 从而提出了一个计算直链烷烃衍生物 Wiener 指数的简便方法, 达到简化计算的目的. 该方法简化了传统 Wiener 指数的计算方法, 使 Wiener 指数的计算具有效率高、不易出错等优点, 便于 Wiener 指数计算程序化, 从而提高了 Wiener 指数的实用性.

关键词: 直链烷烃衍生物, Wiener 指数, 位置指数, 计算方法

中图分类号: O641

拓扑指数是从化合物的结构图衍生出来的一种数学不变量, 迄今为止, 已经发表的拓扑指数已远远超过百种^[1]. 目前, 分子拓扑指数已成为研究化合物结构和性能关系的一种有效途径. 其中 Wiener 指数与物性相关性好, 应用面较广^[2].

Wiener 指数 W 、 P 是 Wiener 在 1947 年考察烷烃的沸点与分子结构关系时最先提出的两个拓扑指数^[3]. W 、 P 实际上以隐含的形式使用了分子距离矩阵, 对碳原子数为 N 的烷烃, 其分子距离矩阵 $D = (d_{ij})_{NN}$, 矩阵元 d_{ij} 表示第 i 个碳原子到第 j 个碳原子之间的距离 (以碳-碳键长为单位), W 是每个碳原子至所有其余碳原子的拓扑距离之和的一半, P 为 $d_{ij} = 3$ 的矩阵元的数目的一半, 其数学表达式分别为

$$W = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N d_{ij} \quad (1)$$

$$P = \frac{1}{2} \sum_{d_{ij}=3} (d_{ij}/3) \quad (2)$$

Wiener 在提出 Wiener 指数时, 就对直链烷烃的 Wiener 指数 W_0 、 P_0 推导出了极其简单的计算公式^[3]:

$$W_0 = (N^3 - N)/6 \quad (3)$$

$$P_0 = N - 3 \quad (4)$$

(3)、(4) 两式中 N 为分子中的碳原子数.

至于直链烷烃衍生物的 Wiener 指数, 目前尚未见有简便的计算方法报道, 仍须按照定义或者用分

子距离矩阵进行计算, 工作量很大, 实际应用极为不便. 因此, 研究直链烷烃衍生物的 Wiener 指数的简便计算方法是非常必要的.

1 基本原理及计算方法的提出

本文提出的直链烷烃衍生物 Wiener 指数简便算法的基本思路是, 根据直链烷烃衍生物的结构特点, 把取代基 (或基团) 看作一个特殊的“原子” G . 然后从单取代烷烃入手探讨烷基链和“原子” G 的 Wiener 指数与直链烷烃衍生物的 Wiener 指数 W 、 P 之间的定量关系.

1.1 位置拓扑指数 S_G 和拓扑指数 R_G 的计算方法

为了便于研究, 本文引入了位置拓扑指数 S_G ^[4] (表示“原子” G 到烷基链上各个碳原子距离之和) 和拓扑指数 R_G (表示“原子” G 与烷基链上的碳原子之间的距离为 3 的数目), 并推导出如下简便算法:

$$S_G = (N - i + 1)(N - i + 2)/2 + i(i + 1)/2 - 1 \quad (5)$$

$$R_G = \begin{cases} i \leq 2 \\ 1, N - i \leq 2 \\ 2, 3 \leq i \leq N - 3 \end{cases} \quad (6)$$

式中, N 为烷基链的碳原子数; i 为“原子” G 在烷基链上的位置序号 (下同). 以 2-氯戊烷为例, S_G 和 R_G 的计算方法如下:

$$S_G = (5 - 2 + 1)(5 - 2 + 2)/2 + 2(2 + 1)/2 - 1 = 12;$$

$$R_G = 1.$$

1.2 单取代烷烃 Wiener 指数的计算方法

表 1 Wiener 指数 W 的计算值Table 1 The calculated Wiener index W values

Substituted alkane	W_0 S_G	W_{ij}	W
2-G* octane	84 30		114
3-G octane	84 26		110
4-G octane	84 24		108
5-G octane	84 24		108
2, 2-di G octane	84 30 30	2	146
2, 3-di G octane	84 30 26	3	143
2, 4-di G octane	84 30 24	4	142
2, 5-di G octane	84 30 24	5	143
3, 3-di G octane	84 26 26	2	138
3, 4-di G octane	84 26 24	3	137
3, 5-di G octane	84 26 24	4	138
4, 4-di G octane	84 24 24	2	134
4, 5-di G octane	84 24 24	3	135
5, 5-di G octane	84 24 24	2	134
2, 2, 3-tri G octane	84 30 30 26	2 3 3	178
2, 2, 4-tri G octane	84 30 30 24	2 4 4	178
2, 2, 5-tri G octane	84 30 30 24	2 5 5	180
2, 3, 3-tri G octane	84 30 26 26	3 3 2	174
2, 3, 4-tri G octane	84 30 26 24	3 4 3	174
2, 3, 5-tri G octane	84 30 26 24	3 5 4	176
2, 4, 4-tri G octane	84 30 24 24	4 4 2	172
2, 4, 5-tri G octane	84 30 24 24	4 5 3	174
2, 5, 5-tri G octane	84 30 24 24	5 5 2	174
3, 3, 4- tri G octane	84 26 26 24	2 3 3	168
3, 3, 5- tri G octane	84 26 26 24	2 4 4	170
3, 4, 4- tri G octane	84 26 24 24	3 3 2	166
3, 4, 5- tri G octane	84 26 24 24	3 4 3	168
3, 5, 5- tri G octane	84 26 24 24	4 4 2	168
2, 2, 4, 4-tetra G octane	84 30 30 24 24	2 4 4 4 2	212
2, 3, 4, 5-tetra G octane	84 30 26 24 24	3 4 5 3 5 3	211

W_0 : the Wiener index W values of linear alkane; S_G : the sum of distance between G and alky chain carbon atoms; W_{ij} : the distance between G_i and G_j ; W : the Wiener index W values of substituted derivatives of linear alkanes. * G : substituted group

经过对距离矩阵的仔细研究和计算发现, 链烷烃的 Wiener 指数 W_0 、 P_0 和“原子” G 的拓扑指数 S_G 、 R_G 与直链烷烃衍生物的 Wiener 指数 W 、 P 相互之间有如下关系:

$$W = W_0 + S_G \quad (7)$$

$$P = P_0 + R_G \quad (8)$$

表 2 Wiener 指数 P 的计算值Table 2 The calculated Wiener index P values

Substituted alkane	P_0 R_G	R_{ij}	P
2-G* octane	5 1		6
3-G octane	5 2		7
4-G octane	5 2		7
5-G octane	5 2		7
2, 2-di G octane	5 1 1	0	7
2, 3-di G octane	5 1 2	1	9
2, 4-di G octane	5 1 2	0	8
2, 5-di G octane	5 1 2	0	8
3, 3-di G octane	5 2 2	0	9
3, 4-di G octane	5 2 2	1	10
3, 5-di G octane	5 2 2	0	9
4, 4-di G octane	5 2 2	0	9
4, 5-di G octane	5 2 2	1	10
5, 5-di G octane	5 2 2	0	9
2, 2, 3-tri G octane	5 1 1 2	0 1 1	11
2, 2, 4-tri G octane	5 1 1 2	0 0 0	9
2, 2, 5-tri G octane	5 1 1 2	0 0 0	9
2, 3, 3-tri G octane	5 1 2 2	1 1 0	12
2, 3, 4-tri G octane	5 1 2 2	1 0 1	12
2, 3, 5-tri G octane	5 1 2 2	1 0 0	11
2, 4, 4-tri G octane	5 1 2 2	0 0 0	10
2, 4, 5-tri G octane	5 1 2 2	0 0 1	11
2, 5, 5-tri G octane	5 1 2 2	0 0 0	10
3, 3, 4- tri G octane	5 2 2 2	0 0 1	12
3, 3, 5- tri G octane	5 2 2 2	0 0 0	11
3, 4, 4- tri G octane	5 2 2 2	1 0 0	12
3, 4, 5- tri G octane	5 2 2 2	1 0 1	13
3, 5, 5- tri G octane	5 2 2 2	0 0 0	11
2, 2, 4, 4-but G octane	5 1 1 2 2	0 0 0 0 0 0	11
2, 3, 4, 5-but G octane	5 1 2 2 2	1 0 0 1 0 1	15

P_0 : the Wiener index P values of linear alkane; R_G : the number of distance between G and alky chain carbon atoms is three; R_{ij} : the number of distance between G_i and G_j is three; P : the Wiener index P values of substituted derivatives of linear alkanes. * G : substituted group

1.3 双取代烷烃 Wiener 指数的计算方法

为了便于说明该计算方法, 本文又引入了两个拓扑指数 W_{ij} (表示两个取代基之间的距离) 和 R_{ij} (表示两个取代基之间的距离是否为 3)。假设 i 不大于 j (j 为取代基的位置序号, 下同), 则它们的计算方法如下:

$$W_{ij} = (j - i) + 2 \quad (9)$$

$$R_{ij} = \begin{cases} 0, & j - i \neq 1 \\ 1, & j - i = 1 \end{cases} \quad (10)$$

采用前面的方法,利用式(5)、(6)分别计算出原子 G_i 、 G_j 的拓扑指数 S_{G_i} 、 S_{G_j} 、 R_{G_i} 、 R_{G_j} 并结合 W_{ij} 、 R_{ij} ,可以推导出下面的计算公式:

$$W = W_0 + S_{G_i} + S_{G_j} + W_{ij} \quad (11)$$

$$P = P_0 + R_{G_i} + R_{G_j} + R_{ij} \quad (12)$$

1.4 多取代烷烃 Wiener 指数的计算公式

对于多取代烷烃,采用类似的方法推导其计算公式.对含有 m 个取代基碳原子数为 N 的直链烷烃,其 Wiener 指数的计算公式如下:

$$W = W_0 + \sum_i S_{G_i} + \frac{1}{2} \sum_i \sum_j W_{ij} \quad (13)$$

$$P = P_0 + \sum_i R_{G_i} + \frac{1}{2} \sum_i \sum_j R_{ij} \quad (14)$$

当 $m=2$ 时,式(13)、(14)就相应转化为式(11)、(12);当 $m=1$ 时,式(13)、(14)就相应转化为式(7)、(8);当 $m=0$ 时,式(13)、(14)就相应转化为式(3)、(4).由此可以证明式(13)、(14)具有一定的通用性.下面以2,3,4-三甲基辛烷为例说明计算过程:由式(3)、(4)得, $W_0=84$, $P_0=5$;由式(5)、(6)得, $S_{G_2}=30$, $S_{G_3}=26$, $S_{G_4}=24$, $R_{G_2}=1$, $R_{G_3}=2$, $R_{G_4}=2$;由式(9)、(10)得, $W_{23}=3$, $W_{34}=3$, $W_{24}=4$, $R_{23}=1$, $R_{34}=1$, $R_{24}=0$;由式(13)、(14)得, $W=84+(30+26+24)+(3+3+4)=174$,

$$P=5+(1+2+2)+(1+1+0)=12.$$

2 结果与讨论

为了检验上面公式的正确性,本文对三十种不同结构的支链烷烃进行了计算并按照定义的方法利用距离矩阵进行了验算. Wiener 指数 W 、 P 的计算结果分别见表1和表2. 验算的结果表明,本文提出的方法是正确的.

3 结束语

近年来, Wiener 指数 W 、 P 在有机物定量结构-性质关系的研究中应用很广泛. 本文给出了计算直链烷烃衍生物的 Wiener 指数 W 、 P 的简便方法. 该方法的提出不仅可以促进 Wiener 指数的应用,而且将有助于直链烷烃衍生物的定量结构-性质关系的深入研究.

References

- Xu, L.; Hu, C. Y. Graph theory of applied chemistry. Beijing: Science Press, 2000: 43 [许 禄, 胡昌玉. 应用化学图论. 北京: 科学出版社, 2000: 43]
- Schultz, H. P. *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, **1989**, **29**(3): 227
- Wiener, H. *J. Am. Chem. Soc.*, **1947**, **69**(1): 17
- Zheng, Q. *Journal of Yancheng Institute of Technology*, **1998**, **11**(3): 25 [郑 清. 盐城工学院学报(*Yancheng Gongxueyuan Xuebao*), **1998**, **11**(3): 25]

A Simple Algorithm for Wiener Index of Substituted Derivatives of Linear Alkanes*

Ding Wei Liu Xian-Jun Yu Tao Wu Wen-Xiang¹ Liu Na Zhang Yan-Qiu
(Chemistry and Chemical Engineering Institute; ¹Petroleum Engineering Institute, Daqing Petroleum Institute, Daqing 163318)

Abstract Based on the characteristics of molecular topological structure of linear alkane substituted derivatives, linear alkane substituted derivatives were divided into linear chain unit and substituted groups. Then according to the characteristics of the topological structure of each part, the formulae for the calculation of Wiener index have been given. So a new and simple algorithm for calculating Wiener index has been proposed, which simplified the calculation of Wiener index. This new algorithm has the advantages of high efficiency, accurate compared with that of the traditional algorithm for Wiener index, and can be easily used in computer program for Wiener index. Thus the practicability of Wiener index has been improved.

Keywords: Substituted derivatives of linear alkanes, Wiener index, Site index, Algorithm

Received: March 24, 2004; Revised: May 28, 2004. Correspondent: Ding Wei (E-mail: dingwei@dqi.net; Tel: 0455-6500656).

*The Project Supported by NKBRP(G1999022500)