

## Uso do maior valor singular como descritor topológico na modelagem de dados termodinâmicos de alcanos

Lidia A. R. Silva(IC), Luciano S. Virtuoso(PQ) e Nelson H. T. Lemes(PQ)\*

Departamento de Ciências Exatas, Universidade Federal de Alfenas (37130-000) Alfenas – Minas Gerais

\*nelsonlemes@unifal-mg.edu.br

Palavras Chave: descritor topológico, QSPR e temperatura de ebulição.

### Introdução

Os grafos são abstrações matemáticas, de pontos e linhas, uma ferramenta simples e poderosa na construção de modelos relacionados com arranjos de objetos. No aspecto topológico podemos identificar as estruturas moleculares como grafos, portanto, esta teoria pode ser usada na química para modelar características estruturais das substâncias.<sup>1</sup>

A modelagem de estruturas químicas por grafos pode ser utilizada na previsão de propriedades físico-químicas e atividades biológicas dos compostos, devido à estreita relação destas propriedades/atividades com o arranjo e conectividade dos átomos na estrutura das substâncias. Um estudo quantitativo da relação estrutura-propriedade/atividade, QSPR ou QSAR, é facilmente explorado pelo uso de grafos.<sup>1</sup>

Neste trabalho o valor singular máximo, das matrizes adjacente e distância, será avaliado e comparado como proposta de um novo índice topológico na modelagem de dados termodinâmicos de hidrocarbonetos alifáticos.

### Resultados e Discussão

O índice topológico oferece um caminho para caracterizar numericamente uma estrutura química, este índice é construído a partir do grafo representativo da molécula.

Computacionalmente os grafos são melhores tratados numa estrutura algébrica matricial. Neste caso, uma matriz é utilizada para representar o grafo, com elementos adequadamente definidos para descrever a estrutura topológica do grafo. A partir da matriz definimos o índice topológico.

O índice topológico caracteriza a estrutura molecular por meio de um único número, descrevendo características como conectividade dos átomos e distribuição espacial. Existem diferentes propostas de índices topológicos apresentados na literatura, cada índice inclui determinados aspectos estruturais e acaba sendo adequado para descrever determinadas propriedades.

Um alcano de fórmula geral  $C_nH_{2n+2}$  é representado por um grafo  $G$ , ignorando os hidrogênios, com  $n$  vértices, representando os  $n$  carbonos, e  $n-1$  arestas, representando as  $n-1$  ligações de C-C. Uma matriz  $D$ , matriz distância, de dimensão  $n \times n$ , é criada fazendo o elemento  $D_{ij}$  igual

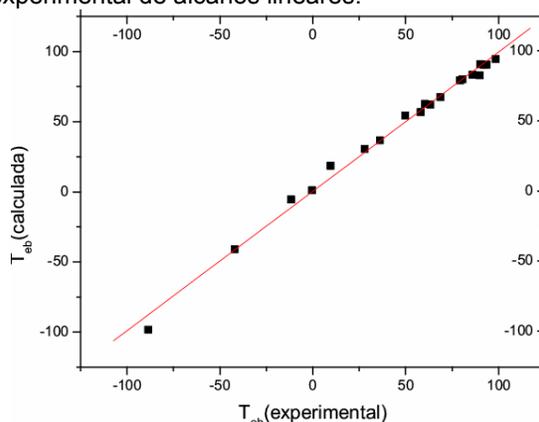
ao número de arestas (ligações) entre os vértices (átomos)  $i$  e  $j$ .

Neste trabalho, propomos a utilização da raiz quadrada do maior valor singular da matrizes distância como índice topológico para modelagem da temperatura de ebulição de alcanos.

$$T_{eb} (^{\circ}C) = 61,40\sqrt{\sigma_{\max}(D)} - 143,28$$

Fizemos a comparação com os índices mais usados da literatura.<sup>2,3,4</sup> Outras propriedades e índices baseados na combinação das matrizes adjacência e distância foram usadas neste estudo. A figura (1) mostra a qualidade dos resultados obtidos.

Figura 1. Temperatura de ebulição predita pelo índice topológico em função da temperatura experimental de alcanos lineares.



### Conclusões

O índice proposto apresentou um alto grau de relacionamento linear com o parâmetro físico-químico, conforme comprovado pelo cálculo de  $R=0,9916$ , comparável aos da literatura.<sup>2,3,4</sup> Este caminho representa uma alternativa na correlação quantitativa estrutura-propriedade destes compostos.

### Agradecimentos

Um dos autores, Lídia A. R. Silva, gostaria de agradecer à FAPEMIG pela bolsa.

<sup>1</sup> Reinhard, M. E Drefahl, A.; *Handbook for Estimating Physicochemical Properties of Organic Compounds*; John-Wiley & Sons, New York, 1999.

<sup>2</sup> Schultz, H. P.; *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, **30**, 27-29, 1990.

<sup>3</sup> Schultz, H. P. e Schultz, T. P.; *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, **40**, 107-112, 2000.

<sup>4</sup> Schultz, H. P.; Schultz, E. B. e Schultz, T. P.; *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, **32**, 69-72, 1992.