

М. Ю. Долломатов (д.х.н., проф.) ^{1,2}, О. С. Коледин (асп.) ¹, Э. А. Ковалева (к.т.н., доц.) ¹,
Р. А. Федина (к.т.н., асс.) ¹, Р. В. Гарипов (магистрант) ¹, М. Р. Валеев (магистрант) ¹

МОДЕЛЬ QSPR ДЛЯ ПРОГНОЗА ТЕМПЕРАТУР ВСПЫШКИ ОДНОАТОМНЫХ НАСЫЩЕННЫХ СПИРТОВ ПО ТОПОЛОГИЧЕСКИМ ХАРАКТЕРИСТИКАМ МОЛЕКУЛ

¹ Уфимский государственный нефтяной технический университет,
кафедра «Технология нефти и газа»; кафедра «Информационные технологии и прикладная математика»
450064, г. Уфа, ул. Космонавтов, 1; e-mail: o.s.koledin@yandex.ru

² Башкирский государственный университет,
кафедра «Физическая электроника и нанофизика»
450076, г. Уфа, ул. Заки Валиди, 32; e-mail: dolomatov@gmail.com

M. Yu. Dolomatov ^{1,2}, O. S. Koledin ¹, E. A. Kovaleva ¹, R. A. Fedina ¹, R. V. Garipov ¹, M. R. Valeev ¹

THE QSPR MODEL FOR PREDICTING FLASH TEMPERATURES OF SINGLE-ATOM SATURATED ALCOHOLS BASED ON THE TOPOLOGICAL CHARACTERISTICS OF MOLECULES

¹ Ufa State Petroleum Technological University
1, Kosmonavtov Str., 450064, Ufa, Russia; e-mail: o.s.koledin@yandex.ru

² Bashkir State University
32, Zaki Validi, 450076, Ufa, Russia; e-mail: dolomatov@gmail.com

Для прогноза температур вспышки одноатомных насыщенных спиртов предложена нелинейная многомерная регрессионная модель *Quantitative Structure–Property Relationship (QSPR)*. Объектами исследования стали 25 спиртов, отбор в базовую и тестовую выборки сделан случайным образом с использованием компьютерной базы данных физико-химических свойств. Модель связывает с температурами вспышки набор дескрипторов – топологических характеристик их молекулярных графов: сумму квадратов собственных значений матрицы смежности и число электронов, влияющие на температуры вспышки и отражающие основные структурно-химические факторы, такие как энергетические параметры молекул, учет атомов водорода. Адекватность моделей подтверждена статистической обработкой данных, так коэффициент детерминации модели равен 0.963. Для характеристики качества модели QSPR был вычислен коэффициент множественной корреляции $r = 0.981$, что подтверждает сильную связь предложенных топологических характеристик молекул спиртов с их температурами вспышки. Модель адекватно описывает температуры вспышки спиртов линейного и разветвленного строения и может быть использована для прогноза.

A nonlinear multivariate *Quantitative Structure–Property Relationship (QSPR)* regression model is proposed for predicting flash temperatures of single-atom saturated alcohols. The objects of the study were 25 alcohols, the selection in the base and test samples was made randomly using a computer database of physical and chemical properties. The model relates to flash temperatures a set of descriptors – topological characteristics of their molecular graphs: the sum of squares of the adjacency matrix eigenvalues and the number of electrons, which affect flash temperatures and reflect basic structural and chemical factors, such as energy parameters of molecules, hydrogen atom accounting. The adequacy of the models is confirmed by statistical data processing, so the coefficient of determination of the model is 0.963. To characterize the quality of the QSPR model, the multiple correlation coefficient $r = 0.981$ was calculated, which confirms the strong relationship of the proposed topological characteristics of alcohol molecules with their flash temperatures. The model adequately describes the flash temperatures of alcohols of linear and branched structure and can be used to predict the flash temperatures.

Дата поступления 16.01.22

Ключевые слова: модель QSPR; спирты; температура вспышки; топологические индексы; число электронов.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта №20-38-90085 «Прогнозирование физико-химических свойств углеводородных и гетероатомных компонентов нефтяных систем и моторных топлив».

Как известно, температура вспышки является важным показателем в теории горения и взрыва и характеризует способность вещества к воспламенению. Это наименьшая температура, при которой образующиеся над поверхностью вещества пары способны воспламениться в атмосферной среде от внешнего источника тепла без перехода в процесс адиабатического горения¹⁻³.

В настоящее время для нахождения температуры вспышки наиболее часто применяется лабораторный метод определения в открытом тигле, в России регламентируется межгосударственным стандартом ГОСТ 4333-2014 (ISO 2592:2000), на территории США стандартом ASTM D92-18. На точность метода оказывают влияние множество факторов, такие как атмосферное давление и влажность воздуха, чистота образца и др.⁴.

Известны более простые расчетные методы оценки температур вспышки на основе информации о строении молекул веществ, использующие модели, связывающие температуру вспышки со структурно-химическими характеристиками соединений. В числе распространенных моделей наиболее известны модели групповых инкрементов, например⁵ и модели структура-свойство *Quantitative Structure-Property Relationship (QSPR)*⁶⁻⁸. Кроме того, известна модель⁷, использующая величину теплоты сгорания вещества и количество атомов углерода в нем для прогнозирования температуры вспышки веществ.

В гомологических рядах углеводородов температура вспышки изменяется нелинейно с увеличением числа углеродных атомов в молекуле, и это представляет сложность при использовании линейных моделей прогнозирования.

Цель данной работы – разработка адекватной многофакторной нелинейной QSPR модели прогнозирования температур вспышек для различных одноатомных насыщенных спиртов.

Для построения полужемпирической феноменологической модели QSPR предположено использовать топологические дескрипторы, которые косвенно отражают энергетические характеристики молекулярных графов, учитывающих

Key-words: alcohols; flash point; QSPR model; topological indices; the number of electron.

The study was carried out with the financial support of the Russian Foundation for Basic Research within the framework of the scientific project No.20-38-90085 «Prediction of the physicochemical properties of hydrocarbon and heteroatomic components of petroleum systems and motor fuels».

только атомы углерода, а также дескрипторы, учитывающие все атомы молекулы путем введения числа электронов для гетероатомных соединений.

Экспериментальная часть

Для построения обучающей выборки выбраны 25 одноатомных алифатических нормальных и алкилзамещенных спиртов по которым имеется надежная информация. Информация, по температурам вспышки выбиралась из базы данных и справочной литературы^{9, 10}. Отбор спиртов в базовую (экспериментальную, обучающую) и тестовую (контрольную) выборки проводился случайным образом.

В качестве энергетических хюккелевских характеристик молекул используем сумму квадратов собственных значений топологической матрицы. Известно, что это матрица характеризует хюккелевский спектр молекулярного графа, примененный ранее для прогнозирования термодинамических свойств углеводородов^{11, 12-15}.

$$L = \sum_{i=1}^N \varepsilon_i^2 \quad (1)$$

Для того чтобы учесть влияние атомов (вес всех вершин в молекулярном графе) введем физический дескриптор – число электронов для гетероатомных соединений¹⁶.

$$N = 6x + 7y + 8z + n + 16q, \quad (2)$$

где x – число атомов углерода;
 y – число атомов азота;
 z – число атомов кислорода;
 n – число атомов водорода;
 q – число атомов серы.

N – полное число электронов, равное числу протонов в молекуле¹⁶.

В табл. 1 приведены соответствующие суммы квадратов собственных значений топологической матрицы (L) и число электронов (N) для исследуемого ряда 25 спиртов.

Таблица 1
Значения топологических индексов
для спиртов (25 веществ)

Соединение	Брутто-формула	N_e	L
Метанол	CH_4O	18	5.28
Этанол	C_2H_6O	26	7.28
<i>n</i> -Пропанол	C_3H_8O	34	9.28
<i>n</i> -Бутанол	$C_4H_{10}O$	42	11.28
<i>n</i> -Пентанол	$C_5H_{12}O$	50	13.28
<i>n</i> -Гексанол	$C_6H_{14}O$	58	15.28
<i>n</i> -Гептанол	$C_7H_{16}O$	66	17.28
<i>n</i> -Октанол	$C_8H_{18}O$	74	19.28
<i>n</i> -Нонанол	$C_9H_{20}O$	82	21.28
<i>n</i> -Деканол	$C_{10}H_{22}O$	90	23.28
<i>n</i> -Ундеканол	$C_{11}H_{24}O$	98	25.28
<i>n</i> -Додеканол	$C_{12}H_{26}O$	106	27.28
<i>n</i> -Тридеканол	$C_{13}H_{28}O$	114	29.28
<i>n</i> -Тетрадеканол	$C_{14}H_{30}O$	122	31.28
<i>n</i> -Пентадеканол	$C_{15}H_{32}O$	130	33.28
<i>n</i> -Гексадеканол	$C_{16}H_{34}O$	138	35.28
<i>n</i> -Октадеканол	$C_{18}H_{38}O$	154	39.28
<i>n</i> -Нонадеканол	$C_{19}H_{40}O$	162	41.28
2-Метил-1-пропанол	$C_4H_{10}O$	42	11.28
2-Пентанол	$C_5H_{12}O$	50	13.28
3-Пентанол	$C_5H_{12}O$	50	13.28
2-Метил-1-бутанол	$C_5H_{12}O$	50	13.28
2-Этил-1-бутанол	$C_6H_{14}O$	58	15.28
2-Гексанол	$C_6H_{14}O$	58	15.28
2-Метил-1-пентанол	$C_6H_{14}O$	58	15.28
3,3-Диметил-1-бутанол	$C_6H_{14}O$	58	15.28
4-Метил-2-пентанол	$C_6H_{14}O$	58	15.28
2-Гептанол	$C_7H_{16}O$	66	17.28
2,3,4-Триметил-1-пентанол	$C_8H_{18}O$	74	19.28
2,2,4-Триметил-1-пентанол	$C_8H_{18}O$	74	19.28

$$T_{всп} = f(N, L) \quad (3)$$

Предположим, что в гомологическом ряду органических соединений при переходе от одного соединения к другому температура вспышки изменяется незначительно, тогда разлагая (3) в ряд Маклорена в окрестностях точки (0,0) имеем [17, 18]:

$$T_{всп} = f(N, L) = f_0 + N \frac{\partial f_0}{\partial N} + L \frac{\partial f_0}{\partial L} + \frac{N^2}{2} \frac{\partial^2 f_0}{\partial N^2} + \frac{L^2}{2} \frac{\partial^2 f_0}{\partial L^2} + NL \frac{\partial^2 f_0}{\partial N \partial L} + x_2(N, L) \quad (4)$$

где $T_{всп}$ – температура вспышки;
 $x_2(N, L)$ – остаточный член.

Перепишем (4) в регрессионном виде

$$T_{всп} = a_0 + a_1 \cdot N + a_2 \cdot L + a_3 \cdot N^2 + a_4 \cdot L^2 + a_5 \cdot NL \quad (5)$$

где a_i , ($i=0, \dots, 5$) – коэффициенты модели QSPR, полученные методом наименьших квадратов.

Расчеты, проведенные простым методом наименьших квадратов, значения и влияние независимых величин (топологических индексов) на изменение температуры вспышки приведены в табл. 2.

Таблица 2
Коэффициенты модели (5), стандартная
ошибка и *t*-статистика
для расчета температуры вспышки

a_n	a_n, K	Стандартная ошибка	<i>t</i> -Статистика
a_0	$-1.12834 \cdot 10^{13}$	$2.89987 \cdot 10^{13}$	-0.389101409
a_1	$-3.22515 \cdot 10^{12}$	$1.44871 \cdot 10^{13}$	-0.222622699
a_2	0	0	65535
a_3	$1.2543 \cdot 10^{11}$	$2.10199 \cdot 10^{12}$	0.05967213
A_4	$1.85461 \cdot 10^{13}$	$4.76639 \cdot 10^{13}$	0.389101409
A_5	$-5.13824 \cdot 10^{12}$	$8.96697 \cdot 10^{12}$	-0.573018701

В ходе оценки значимости коэффициентов регрессии методом наименьших квадратов было получено, что коэффициенты a_1 и a_2 незначимы.

С учетом значимых коэффициентов регрессии модель QSPR имеет вид (6):

$$T_{всп} = a_0 + a_1 \cdot N^2 + a_2 \cdot NL + a_3 \cdot L^2 \quad (6)$$

где $T_{всп}$ – температура вспышки, К;
 L – сумма квадратов собственных значений матрицы смежности;
 N – число электронов;
 a_n ($n = 0, \dots, 3$) – коэффициенты модели, полученные методом наименьших квадратов, К.

Рассмотрим аналитическое выражение (6). Значения и влияние независимых величин (топологических индексов) на изменение температуры вспышки приведены в табл. 3.

Таблица 3
Коэффициенты модели (6), стандартная
ошибка и *t*-статистика
для расчета температуры вспышки

a_n	a_n, K	Стандартная ошибка	<i>t</i> -Статистика
a_0	271.8652	21.47348	12.66051
a_1	-0.17002	0.60872	-0.2793
a_2	-6.2947	22.75816	-0.27659
a_3	10.87778	38.95776	0.27922

В табл. 4 приведено сравнение справочных и рассчитанных значений температуры вспышки спиртов, а также относительная погрешность.

**Сравнение справочных и расчетных значений
температуры вспышки спиртов (базовая выборка)**

Соединение	Формула	$T_{сп}, K$	$T_{расч}, K$	$\Delta_{отн}, \%$	$\Delta_{абс}, K$
Метанол	CH_4O	283.7	283.3	0.15	0.4
Этанол	C_2H_6O	286.5	289.2	0.93	2.7
<i>n</i> -Пропанол	C_3H_8O	298.2	296.7	0.49	1.5
<i>n</i> -Бутанол	$C_4H_{10}O$	310.5	302.0	2.75	8.5
<i>n</i> -Пентанол	$C_5H_{12}O$	322.2	310.9	3.51	11.3
<i>n</i> -Гексанол	$C_6H_{14}O$	314.2	320.8	2.10	6.6
<i>n</i> -Гептанол	$C_7H_{16}O$	346.2	331.5	4.24	14.7
<i>n</i> -Октанол	$C_8H_{18}O$	354.2	342.9	3.20	11.3
<i>n</i> -Нонанол	$C_9H_{20}O$	353.2	354.7	0.43	1.5
<i>n</i> -Деканол	$C_{10}H_{22}O$	377.6	366.9	2.83	10.7
<i>n</i> -Ундеканол	$C_{11}H_{24}O$	386.2	379.3	1.80	6.9
<i>n</i> -Додеканол	$C_{12}H_{26}O$	400	391.6	2.09	8.4
<i>n</i> -Тридеканол	$C_{13}H_{28}O$	389.2	403.9	3.78	14.7
<i>n</i> -Тетрадеканол	$C_{14}H_{30}O$	418.2	415.9	0.56	2.3
<i>n</i> -Пентадеканол	$C_{15}H_{32}O$	429	427.4	0.38	1.6
<i>n</i> -Гексадеканол	$C_{16}H_{34}O$	443	438.3	1.06	4.7
<i>n</i> -Октадеканол	$C_{18}H_{38}O$	458.2	457.7	0.12	0.5
<i>n</i> -Нонадеканол	$C_{19}H_{40}O$	464	465.8	0.39	1.8
2-Метил-1-пропанол	$C_4H_{10}O$	303.2	302.0	0.41	1.2
2-Пентанол	$C_5H_{12}O$	313.7	310.9	0.89	2.8
3-Пентанол	$C_5H_{12}O$	313.2	310.9	0.73	2.3
2-Метил-1-бутанол	$C_5H_{12}O$	303.2	310.9	2.54	7.7
2-Этил-1-бутанол	$C_6H_{14}O$	330.2	320.8	2.85	9.4
2-Гексанол	$C_6H_{14}O$	314	320.8	2.17	6.8
2-Метил-1-пентанол	$C_6H_{14}O$	318.2	320.8	0.82	2.6

Обсуждение результатов

Для того чтобы определить, с какой степенью точности регрессионное уравнение (6) аппроксимирует исходные данные, нами был вычислен коэффициент детерминации $R_2 = 0.963$. Можно утверждать, что модель в целом адекватно позволяет прогнозировать температуру вспышки. Для характеристики качества модели *QSPR* был вычислен коэффициент множественной корреляции $r = 0.981$, подтверждающий сильную связь предложенных топологических характеристик молекул спиртов с их температурой вспышки. Для оценки статистической достоверности модели *QSPR* использовали корреляционную поправку (среднеквадратическую ошибку коэффициента корреляции):

$$S_r = \sqrt{\frac{1 - R^2}{n - 2}}, \quad (7)$$

где S_r – корреляционная поправка;
 r – коэффициент множественной корреляции;
 n – число исследуемых соединений.

В нашем случае $n = 30$, $r = 0.981$, получаем

$$S_r = 0.032 \text{ и } \left| \frac{R}{S_r} \right| = \left| \frac{0.9}{0.032} \right| = 28.1 \text{ для температуры}$$

вспышки, следовательно, связь нельзя считать случайной и линия регрессии проходит через центр облака исходных точек.

Статистическим показателем, позволяющим судить об адекватности прогнозируемых значений, об их соответствии справочным данным, является стандартная ошибка регрессии, определяемая по формуле

$$S_{regression} = \sqrt{\frac{\sum (q_{calc.} - q_{ref.})^2}{n - k - 1}}, \quad (8)$$

где $q_{ref.}$ – справочное значение температуры вспышки;
 $q_{calc.}$ – расчетное (полученное в результате прогноза) значение переменной;
 n – число наблюдений (спиртов);
 k – число членов уравнения регрессии.

В нашем случае $S_{regression} = 9.44$ ед.

Небольшое значение стандартной ошибки регрессии по сравнению со значениями зависимой переменной подтверждает адекватность предложенной модели (6).

В табл. 5 приведена тестовая выборка сравнение справочных и расчетных значений темпера-

**Сравнение справочных и расчетных значений
температуры вспышки спиртов (тестовая выборка)**

Соединение	Формула	$T_{всп}, K$	$T_{расч}, K$	$\Delta_{отн}, \%$	$\Delta_{абс}, K$
2-Октанол	$C_8H_{18}O$	358	342.9	4.23	15.1
2-Этил-1-гексанол	$C_8H_{18}O$	350.2	342.9	2.09	7.3
Изооктанол	$C_8H_{18}O$	346	342.9	0.91	3.1
3-Метил-3-гептанол	$C_8H_{18}O$	327.2	342.9	4.79	15.7
5-Метил-3-гептанол	$C_8H_{18}O$	327.2	342.9	4.79	15.7
2,6-Диметил-4-гептанол	$C_9H_{20}O$	355	354.7	0.08	0.3
8-Метил-1-нонанол	$C_{10}H_{22}O$	377.2	366.9	2.73	10.3
2-Додеканол	$C_{12}H_{26}O$	395	391.6	0.85	3.4
6-Додеканол	$C_{12}H_{26}O$	373	391.6	5.00	18.6
4-Метил-2-пентанол	$C_6H_{14}O$	314.2	320.8	2.10	6.6
2-Гептанол	$C_7H_{16}O$	332.2	331.5	0.21	0.7
2,3,4-Триметил-1-пентанол	$C_8H_{18}O$	333.2	342.9	2.90	9.7
2,2,4-Триметил-1-пентанол	$C_8H_{18}O$	333.2	342.9	2.90	9.7

тур вспышки спиртов не входящих в базовый ряд. Как видно из таблицы, относительная ошибка колеблется в интервале $0.08 \leq \Delta_{отн} \leq 5\%$. Это означает, что модель (6) позволяет осуществлять прогноз температур вспышки ряда спиртов.

Адекватность моделей подтверждена статистической обработкой данных, так коэффициент

детерминации модели равен 0.963. Максимальная относительная ошибка для тестовой выборки температур вспышек составляет 5%. Предложенные зависимости могут быть использованы при проведении инженерных и научных прогнозов температур вспышек различных спиртов.

Литература

1. Фролов С. М. Быстрый переход горения в детонацию // Химическая физика. 2008. Т. 27. № 6. С. 32-46.
2. Шленский О.Ф., Сиренко В.С., Егорова Е.А. Режимы горения материалов. – М.: Машиностроение, 2011. – 220 с.
3. Баум Ф.А., Станюкович К.П., Шехтер Б.И. Физика взрыва. – М.: Физматгиз, 1999. – 264 с.
4. Фролов С. М. Наука о горении и проблемы современной энергетики // Российский химический журнал. – 2008. – Т.52, №6. – С.129-133.
5. Батов Д.В., Сторонкина О.Е., Мочалова Т.А., Модификация аддитивно-группового метода для описания показателей пожарной опасности предельных углеводородов: температур вспышки и самовоспламенения, энтальпии испарения // Пожаровзрывоопасность веществ и материалов. – 2017. – №5. – С.21-28.
6. Баскин И.И., Маджидов Т.И., Варнек А.А. Введение в хемеоинформатику. Моделирование структура–свойство. – Казань: Изд-во Казанского ун-та, 2015. – 302 с.
7. Suhani J. Patel, Dedy Ng, M. Sam Mannan QSPR Flash Point Prediction of Solvents Using Topological Indices for Application in Computer Aided Molecular Design. // Ind. Eng. Chem. Res. – 2010. – V.49, №15. – Pp.8282-8287.
8. Смирнов В.В., Алексеев С.Г., Барбин Н.М. Прогнозирование температуры вспышки диалкиламинов // Журнал Сибирского федерального университета. – 2016. – №9. – С.68-77.
9. Свид. РФ 3201862459 (опубл. 2018). Свидетельство об официальной регистрации базы данных для

References

1. Frolov S.M. [Fast deflagration-to-detonation transition]. *Russian Journal of Physical Chemistry B*, 2008, vol.2, no.3, pp.442-455.
2. Shlensky O.F., Sirenko V.S., Egorova E.A. *Rezhimy gorennya materialov* [Combustion modes of materials]. Moscow, Mashinostroenie Publ., 2011, 220 p.
3. Baum F.A., Stanyukovich K.P., Shekhter B.I. *Fizika vzryva* [Explosion physics]. Moscow, Fizmatgiz Publ., 1999, 264 p.
4. Frolov. S. M. *Nauka o gorenii i problemy sovremennoy energetiki* [Combustion Science and Problems of Modern Energetics]. *Rossiyskiy khimicheskii zhurnal* [Russian Chemical Journal], 2009, vol.52, no.6, pp.129-133.
5. Batov D.V., Storonkina O.E., Mochalova T.A., *Modifikatsiya additivno-gruppovogo metoda dlya opisaniya pokazateley pozhar'noy opasnosti predel'nykh uglevodorodov: temperatur vspyshki i samovosplamneniya, ental'pii ispareniya* [Modification of the additive-group method for describing the indicators of fire hazard of saturated hydrocarbons: flash and autoignition temperatures, enthalpy of vaporization]. *Pozharovzryvoopasnost' veshchestv i materialov* [Fire and Explosion Hazard of Substances and Materials], 2017, no.5, pp.21-286.
6. Baskin I.I., Majidov T.I., Varnek A.A. *Vvedeniye v khemeoinformatiku. Modelirovaniye struktura–svoystvo* [Introduction to chemeoinformatics. Modeling structure–property]. Kazan, Publishing House of Kazan University, 2015, 302 p.
7. Suhani J. Patel, Dedy Ng, and M. Sam Mannan [QSPR Flash Point Prediction of Solvents Using Topological Indices for Application in Computer Aided Molecular Design]. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 2010, vol.49, no.15, pp.8282-8287.

- ЭВМ. База данных физико-химических свойств органических соединений.
10. Баратов А.Н., Корольченко А.Я., Кравчук Г.Н. и др. Пожаровзрывоопасность веществ и материалов и средства их тушения. – М.: Химия, 1990. – 496 с.
11. Цветкович Д., Дуб М., Захс Х. Спектры графов. Теория и применение. – Киев: Наукова думка, 1984. – 384 с.
12. Долوماتов М.Ю., Аубекеров Т.М., Вагапова Э.В., Ахтямова К.Р., Кузнецов Е.А. Взаимосвязь теплоемкости и топологических характеристик соединений в ряду замещенных аренов // Журнал физической химии. – 2019. – Т.93, №2. – С.170-175.
13. Долوماتов М.Ю., Аубекеров Т.М., Коледин О.С., Ахтямова К.Р., Вагапова Э.В., Ковалева Э.А. Дескриптор модели структура-свойство для расчета критической температуры фазового перехода жидкость–пар с топологическими характеристиками молекул алкенов // Журнал физической химии. – 2019. – Т.93, №12. – С.1804-1809.
14. Долوماتов М.Ю., Аубекеров Т.М., Коледин О.С., Ахтямова К.Р., Вагапова Э.В., Ковалева Э.А. Корреляция структура–свойство для расчета критических давлений фазовых переходов жидкость–пар по топологическим характеристикам молекул алкенов // Журнал физической химии. – 2020. – Т.94, №10. – С.1445-1449.
15. Долوماتов М.Ю., Аубекеров Т.М. Взаимосвязь стандартной энтальпии и энтропии образования и топологических характеристик структуры предельных углеводородов // Журнал физической химии. – 2018. Т. 92. №3 С. 355-361.
16. Долوماتов М.Ю., Ковалева Э.А., Коледин О.С. Двухфакторная модель QSPR для прогноза октановых чисел алканов по топологическим дескрипторам и числу электронов в молекуле // Баш. хим. ж. – 2020. – Т.27, №1. – С.56-60.
17. Долوماتов М.Ю., Коледин О.С., Ковалева Э.А., Арсланбекова С.А., Прогноз октановых чисел замещенных алканов по топологическим характеристикам молекул // Бутлеровские сообщения. – 2019. – Т.59, №7. – С.69-75.
18. Долوماتов М.Ю., Коледин О.С., Ковалева Э.А., Аубекеров Т.М. Прогнозирование физико-химических свойств компонентов углеводородных систем с применением топологических дескрипторов. – Казань: Издательство ООО «Инновационно-издательский дом «Бутлеровское наследие», 2021. – 164 с.
8. Smirnov V.V., Alekseev S.G., Barbin N.M. *Prognozirovaniye temperatury vspyshki dialkilaminov* [Flash Point Prediction of Dialkylamines]. *Zhurnal Sibirskogo federal'nogo universiteta* [Journal of the Siberian Federal University], 2016, no.9, pp.68-77.
9. Certificate RF no. 201862459 (publ. 2018). Certificate of official registration of the database for computers. Database of physical and chemical properties of organic compounds.
10. Barato A. N., Korolchenko A. Ya., Kravchuk G. N. et al. *Pozharovzryvoopasnost' veshchestv i materialov i sredstva ikh tusheniya* [Fire and explosion hazard of substances and materials and their extinguishing agents]. Moscow, Khimiya Publ., 1990, 496 p.
11. Tsvetkovich D., Dub M., Zakhs Kh. *Spektry grafov. Teoriya i primeneniye* [Spectra of Graphs. Theory and application]. Kiev, Naukova dumka Publ., 1984, 384 p.
12. Dolomatov M.Yu., Aubekero T.M., Vagapova E.V., Akhtyamova K.R., Kuznetsov E.A. *Vzaimosvyaz' teployemkosti i topologicheskikh kharakteristik soyedineniy v ryadu zameshchennykh arenov* [Relationship between heat capacity and topological characteristics of compounds in a series of substituted arenes] *Zhurnal fizicheskoy khimii* [Journal of Physical Chemistry], 2019, vol.93, no.2, pp.170-175.
13. Dolomatov M.Y., Aubekero T.M., Koledin O.S., Akhtyamova K.R., Vagapova E.V., Kovaleva E.A. [Descriptor of a structure-property model for calculating the critical temperature of a liquid-vapor phase transition with the topological characteristics of alkene molecules]. *Russian Journal of Physical Chemistry A*, 2019, vol.93, no.12, pp.2388-2393.
14. Dolomatov M.Y., Aubekero T.M., Kovaleva E.A., Akhtyamova K.R., Vagapova E.V., Koledin O.S. [Structure–property correlation for calculating the critical pressures of liquid–vapor phase transitions from the topological characteristics of alkene molecules]. *Russian Journal of Physical Chemistry A*, 2020, vol.94, no.10, pp.1966-1970.
15. Dolomatov M.Y., Aubekero T.M. [Relationship between standard enthalpies/entropies of formation and topological structural characteristics for saturated hydrocarbons]. *Russian Journal of Physical Chemistry A*, 2018, vol.92, no.3, pp.401-406.
16. Dolomatov M.Yu., Kovaleva E.A., Koledin O.S. *Dvukhfaktornaya model' QSPR dlya prognoza oktanovykh chisel alkanov po topologicheskim deskriptoram i chislu elektronov v molekule* [A two-factor QSPR model for predicting the octane numbers of alkanes from topological descriptors and the number of electrons in a molecule]. *Bashkirskii khimicheskii zhurnal* [Bashkir Chemical Journal], 2020, vol.27, no.1, pp.56-60.
17. Dolomatov M. Yu., Koledin O. S., Kovaleva E. A., Arslanbekova S. A. *Prognoz oktanovykh chisel zameshchennykh alkanov po topologicheskim kharakteristikam molekul* [Prediction of octane numbers of substituted alkanes from the topological characteristics of molecules]. *Butlerovskiy soobshcheniya* [Butlerov Communications], 2019, vol.59, №7, pp.69-75.
18. Dolomatov M.Yu., Koledin O.S., Kovaleva E.A., Aubekero T.M. *Prognozirovaniye fiziko-khimicheskikh svoystv komponentov uglevodorodnykh sistem s primeneniye topologicheskikh deskriptorov* [Prediction of physicochemical properties of components of hydrocarbon systems using topological descriptors]. – Kazan': Butlerovskoye naslediy Publ., 2021, 164p.