

С. Г. Алексеев (к.х.н., доц., в.н.с.)<sup>1,2</sup>, К. С. Алексеев (к.т.н., н.с., ст. преп.)<sup>1,3</sup>,  
Н. М. Барбин (д.т.н., доц., в.н.с.)<sup>2,3</sup>

## QSPR ПРОГНОЗИРОВАНИЕ СВОЙСТВ ДИАЛКИЛАЛКИНОВ С ПОМОЩЬЮ ПРАВИЛ УГЛЕРОДНОЙ ЦЕПИ

<sup>1</sup> Научно-инженерный центр «Надежность и ресурс больших систем и машин» УрО РАН  
620049, г. Екатеринбург, ул. Студенческая, 54а; e-mail: 3608113@mail.ru, brigalider@gmail.com

<sup>2</sup> Уральский институт государственной противопожарной службы МЧС России,  
620062, г. Екатеринбург, ул. Мира, 22; e-mail: 3608113@mail.ru, nmbarbin@mail.ru

<sup>3</sup> Уральский государственный аграрный университет,  
кафедры химии, агрохимии и почвоведения  
620075, г. Екатеринбург, ул. Карла Либкнехта, 42; e-mail: bri-galider@gmail.com, nmbarbin@mail.ru

S. G. Alekseev<sup>1,2</sup>, K. S. Alekseev<sup>1,3</sup>, N. M. Barbin<sup>2,3</sup>

## QSPR PREDICTION OF PROPERTIES OF DIALKYL ALKYNES BY CARBON CHAIN RULES

<sup>1</sup> Scientific and Engineering Center «Reliability and Resource of Large Systems and Machines» of RAS  
54a, Studencheskaya Str., 620049, Ekaterinburg, Russia; e-mail: 3608113@mail.ru, brigalider@gmail.com

<sup>2</sup> Ural Institute of the State Fire Service of the Ministry of Emergency Situations of Russia,  
22, Mira Str., 620062, Ekaterinburg, Russia; e-mail: 3608113@mail.ru, nmbarbin@mail.ru

<sup>3</sup> Ural State Agrarian University  
42, Karla Liebknechta Str., 620075, Ekaterinburg, Russia; e-mail: bri-galider@gmail.com, nmbarbin@mail.ru

Для диалкилалкинов с помощью правил углеродной цепи определены теплота испарения при нормальной температуре кипения и температура кипения. Проведен сравнительный анализ двух вариантов правил углеродной цепи с методом программного комплекса ACD/Lab 2014 и аддитивно-групповой методикой Смолякова и Гребешкова. Показано, что два варианта метода правил углеродной цепи сопоставимы с методиками сравнения и могут быть использованы для прогнозирования неизвестных значений теплоты испарения при нормальной температуре кипения и температура кипения в ряду диалкилалкинов.

**Ключевые слова:** алкин; правила углеродной цепи; температура кипения; теплота испарения; условная углеродная цепь; хемоинформатика; ACD/Lab; QSPR.

В 1998 г. было предложено новое направление в химии, получившее название хемоинформатика (chemoinformatics), которое включает в себя совместное использование информационных ресурсов для преобразования данных в информацию и далее в знания для быстрого принятия оптимальных решений при поиске новых и оптимизации существующих лекарственных средств<sup>1</sup>. В настоящее время понятие хемоинформатики расширено и под ней понимается применение методов информатики для решения химических проблем<sup>2</sup>. В настоящее время хемоинформатика бурно развивается, о чем свидетельствует появление за последнее десятилетие целого ряда публикаций по данному направлению<sup>3–12</sup>.

The heat of evaporation at normal boiling point and the boiling point are determined for dialkyl alkynes by the rules of the carbon chain. A comparative analysis of two variants of the carbon chain rules with the method of the software ACD/Lab 2014 and the additive group method of Smolyakov and Grebeshkov is carried out. It is shown that two variants of the carbon chain rule method are comparable with the comparison methods and can be used to predict unknown evaporation heat values at normal boiling point and boiling point in the dialkyl alkyne series.

**Key words:** alkyne; boiling temperature; carbon chain rules; chemoinformatics; conditional carbon chain; evaporation heat; QSPR.

Дата поступления 05.06.18

Подход QSPR (Quantitative Structure – Property Relationship) в настоящее время рассматривается как частное направление хемоинформатики. Под ним понимают процедуру построения моделей в хемоинформатике, позволяющих по структурам химических соединений предсказывать их физико-химические и другие свойства. В настоящее время процесс синтеза и выделения новых органических соединений на несколько порядков опережает процесс накопления данных по их физико-химическим и другим свойствам, поэтому QSPR исследования являются удобным и малозатратным вариантом решения данной проблемы.

## Методы и объекты исследования

Недавно нами предложен новый подход к прогнозированию пожароопасных свойств органических соединений, который получил название правила углеродной цепи (далее ПУЦ) <sup>13</sup>. Этот подход представляет собой синтез-методику. Из сравнительного метода прогнозирования он заимствовал подход сравнения физико-химических и пожароопасных свойств в гомологическом ряду. Отличие в данном случае заключается в том, что сравнение производится не между родственными классами органических соединений, а только в пределах одного гомологического ряда. При этом введено допущение, что свойства в одном классе соединений в пределах 2–3 ближайших гомологов нормального строения изменяются по линейному закону. Этот прием позволил ввести новый дескриптор – условная углеродная цепь (УУЦ), под которой понимается приведенная углеводородная цепь молекулы с учетом боковых алкильных заместителей. ПУЦ успешно апробированы на различных классах органических соединений для прогнозирования их пожароопасных показателей <sup>13–16</sup>.

Метод ПУЦ удобно применять, когда класс органических соединений сводится к типу  $R-\Phi(H)$  или  $R_1-\Phi-R_2$ , где  $R$ ,  $R_1$  и  $R_2$  алкильные заместители,  $\Phi$  – функциональная или структурная группа,  $H$  – атом водорода. В качестве последней может также выступать и фрагмент молекулы. Алгоритм применения ручного варианта ПУЦ (далее ПУЦ1) и неручного варианта (ПУЦ2) достаточно подробно описан в предыдущих работах <sup>13–16</sup>.

В качестве объектов исследования выбраны теплота испарения при нормальной температуре кипения ( $L_{HTK}$ ) и температура кипения ( $T_b$ ) диалкилалкинов, а в качестве метода сравнения – дескрипторный подход програм-

мы ACD/Lab 2014 <sup>16,17</sup>. В нашем случае в качестве структурной группы  $\Phi$  удобно использовать ацетиленовый фрагмент « $-\text{C}\equiv\text{C}-$ ». Экспериментальные значения  $L_{HTK}$  и  $T_b$  взяты из справочника С.Л. Явус <sup>18</sup> (табл. 1). Для расчетов по методу ПУЦ2 по экспериментальным данным, приведенным в табл. 1, выведены уравнения (1) и (2)

$$L_{HTK} = -0.0631(\text{УУЦ})^2 + 3.0274\text{УУЦ} + 19.38 \quad (1)$$

$$T_b = -0.7097(\text{УУЦ})^2 + 32.521\text{УУЦ} + 237.8 \quad (2)$$

Результаты прогнозов по методам ПУЦ1, ПУЦ2 и ACD/Lab 2014 представлены в табл. 1.

## Обсуждение результатов

Результаты прогнозирования  $L_{HTK}$  и  $T_b$  алкинов **1–64** по методам ПУЦ1, ПУЦ2 и ACD/Lab 2014 приведены в табл. 1. В качестве критериев сравнения выбраны коэффициент корреляции ( $r$ ),  $RMSE$  (Root Mean Squared Error),  $AARD$  (Average Absolute Relative Deviation) <sup>19</sup>, среднее абсолютное отклонение ( $\varepsilon_{cp}$ ) и среднее квадратическое отклонение ( $\sigma$ ) <sup>20</sup>.

$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (y_i - x_i)^2}{n}}; \quad AARD = \frac{100}{n} \sum_{i=1}^n \frac{|y_i - x_i|}{x_i};$$

$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (|y_i - x_i| - \varepsilon_{cp})^2}; \quad \varepsilon_{cp} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |y_i - x_i|$$

где  $y_i$ ,  $x_i$  – расчетное и экспериментальное значения  $L_{HTK}$  или  $T_b$ ;

$n$  – число соединений в выборке.

Недавно В.М. Смоляковым и В.В. Гребешковым был представлен аддитивно-групповой метод определения  $L_{HTK}$  и  $T_b$  алкинов с учетом первого окружения по атомам и двух топологических дескрипторов <sup>21</sup>, поэтому его статистические характеристики также приведены в столбцах «Г <sup>21</sup>» табл. 2. Необходимо отметить, что в статье <sup>21</sup> выборка алкинов ограничивается нонинами, при этом исходные данные по их теплоте испарения при нормальной температуре кипения диалкилалкинов отличаются от значений  $L_{HTK}$ , приведенных в табл. 2, поэтому статические данные данного метода использованы только для качественного сравнения.

Анализ данных табл. 2 показывает, что рассматриваемые методы А–Г дают сопоставимые результаты прогнозирования теплоты испарения

## Теплота испарения и температура кипения диалкилалкинов

№	R <sub>1</sub>	R <sub>2</sub>	УУЦ	L <sub>нтк</sub> , кДж/моль				T <sub>б</sub> , К			
				18	Прогноз			[19]	Прогноз		
					А	Б	В		А	Б	В
1.	CH <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub>	2.0	25.22	25.42	25.18	26.04	300.1	302.6	300.0	298.7
2.	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	CH <sub>3</sub>	3.0	27.92	27.90	27.89	28.71	329.3	328.9	329.0	329.9
3.	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub>	CH <sub>3</sub>	4.0	30.58	30.43	30.48	31.22	357.7	356.0	356.5	358.5
4.	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	4.0	30.26	30.43	30.48	30.73	354.4	356.0	356.5	352.9
5.	C <sub>4</sub> H <sub>9</sub>	CH <sub>3</sub>	5.0	33.16	32.84	32.94	33.59	385.2	381.7	382.7	385.0
6.	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	5.0	32.70	32.84	32.94	33.19	380.3	381.7	382.7	380.5
7.	C <sub>5</sub> H <sub>11</sub>	CH <sub>3</sub>	6.0	35.60	35.21	35.27	37.26	410.9	406.8	407.4	409.5
8.	C <sub>4</sub> H <sub>9</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	6.0	35.16	35.21	35.27	36.94	406.3	406.8	407.4	406.2
9.	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub>	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub>	6.0	35.02	35.21	35.27	36.00	404.8	406.8	407.4	404.6
10.	C <sub>6</sub> H <sub>13</sub>	CH <sub>3</sub>	7.0	37.90	37.46	37.48	37.95	435.1	430.4	430.7	431.8
11.	C <sub>5</sub> H <sub>11</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	7.0	37.44	37.46	37.48	37.74	430.3	430.4	430.7	430.1
12.	C <sub>4</sub> H <sub>9</sub>	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub>	7.0	37.15	37.46	37.48	37.84	427.2	430.4	430.7	431.2
13.	C <sub>7</sub> H <sub>15</sub>	CH <sub>3</sub>	8.0	40.07	39.47	39.56	40.36	457.8	451.5	452.5	457.7
14.	C <sub>6</sub> H <sub>13</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	8.0	39.56	39.47	39.56	39.84	452.5	451.5	452.5	452.4
15.	C <sub>5</sub> H <sub>11</sub>	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub>	8.0	39.03	39.47	39.56	39.85	446.9	451.5	452.5	452.5
16.	C <sub>4</sub> H <sub>9</sub>	C <sub>4</sub> H <sub>9</sub>	8.0	39.34	39.47	39.56	39.85	450.2	451.5	452.5	452.5
17.	C <sub>8</sub> H <sub>17</sub>	CH <sub>3</sub>	9.0	41.05	41.82	41.52	42.24	467.9	476.1	473.0	477.3
18.	C <sub>7</sub> H <sub>15</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	9.0	41.54	41.82	41.52	41.84	473.2	476.1	473.0	473.2
19.	C <sub>6</sub> H <sub>13</sub>	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub>	9.0	41.40	41.82	41.52	41.80	471.7	476.1	473.0	472.7
20.	C <sub>5</sub> H <sub>11</sub>	C <sub>4</sub> H <sub>9</sub>	9.0	41.36	41.82	41.52	41.80	471.2	476.1	473.0	472.7
21.	C <sub>9</sub> H <sub>19</sub>	CH <sub>3</sub>	10.0	42.95	43.21	43.34	43.66	487.7	490.6	492.0	491.9
22.	C <sub>8</sub> H <sub>17</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	10.0	42.95	43.21	43.34	43.75	487.7	490.6	492.0	492.8
23.	C <sub>7</sub> H <sub>15</sub>	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub>	10.0	42.95	43.21	43.34	43.68	487.7	490.6	492.0	492.1
24.	C <sub>6</sub> H <sub>13</sub>	C <sub>4</sub> H <sub>9</sub>	10.0	42.95	43.21	43.34	43.68	487.7	490.6	492.0	492.1
25.	C <sub>5</sub> H <sub>11</sub>	C <sub>5</sub> H <sub>11</sub>	10.0	42.95	43.21	43.34	43.68	487.7	490.6	492.0	492.1
26.	C <sub>10</sub> H <sub>21</sub>	CH <sub>3</sub>	11.0	44.75	44.60	45.05	45.37	506.3	505.0	509.7	509.3
27.	C <sub>9</sub> H <sub>19</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	11.0	44.75	44.60	45.05	45.56	506.3	505.0	509.7	511.2
28.	C <sub>8</sub> H <sub>17</sub>	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub>	11.0	44.75	44.60	45.05	45.51	506.3	505.0	509.7	510.7
29.	C <sub>7</sub> H <sub>15</sub>	C <sub>4</sub> H <sub>9</sub>	11.0	44.75	44.60	45.05	45.51	506.3	505.0	509.7	510.7
30.	C <sub>6</sub> H <sub>13</sub>	C <sub>5</sub> H <sub>11</sub>	11.0	44.75	44.60	45.05	45.51	506.3	505.0	509.7	510.7
31.	C <sub>11</sub> H <sub>23</sub>	CH <sub>3</sub>	12.0	46.46	46.34	46.62	47.00	524.0	522.9	525.9	525.6
32.	C <sub>10</sub> H <sub>21</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	12.0	46.46	46.34	46.62	47.29	524.0	522.9	525.9	528.5
33.	C <sub>9</sub> H <sub>19</sub>	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub>	12.0	46.46	46.34	46.62	47.30	524.0	522.9	525.9	528.6
34.	C <sub>8</sub> H <sub>17</sub>	C <sub>4</sub> H <sub>9</sub>	12.0	46.46	46.34	46.62	47.30	524.0	522.9	525.9	528.6
35.	C <sub>7</sub> H <sub>15</sub>	C <sub>5</sub> H <sub>11</sub>	12.0	46.46	46.34	46.62	47.30	524.0	522.9	525.9	528.6
36.	C <sub>6</sub> H <sub>13</sub>	C <sub>6</sub> H <sub>13</sub>	12.0	46.46	46.34	46.62	47.30	524.0	522.9	525.9	528.6
37.	C <sub>12</sub> H <sub>25</sub>	CH <sub>3</sub>	13.0	48.08	48.08	48.07	48.55	540.8	540.8	540.6	541.0
38.	C <sub>11</sub> H <sub>23</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	13.0	48.08	48.08	48.07	48.93	540.8	540.8	540.6	544.8
39.	C <sub>13</sub> H <sub>27</sub>	CH <sub>3</sub>	14.0	49.64	49.82	49.40	50.03	556.8	558.7	554.0	555.5
40.	C <sub>12</sub> H <sub>25</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	14.0	49.64	49.82	49.40	50.51	556.8	558.7	554.0	560.2
41.	C <sub>14</sub> H <sub>29</sub>	CH <sub>3</sub>	15.0	51.14	51.56	50.59	51.43	572.1	576.6	565.9	569.2
42.	C <sub>13</sub> H <sub>27</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	15.0	51.14	51.56	50.59	52.01	572.1	576.6	565.9	574.8
43.	C <sub>15</sub> H <sub>31</sub>	CH <sub>3</sub>	16.0	52.72	53.30	51.66	52.78	586.8	594.5	576.5	582.2
44.	C <sub>14</sub> H <sub>29</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	16.0	52.72	53.30	51.66	53.45	586.8	594.5	576.5	588.6
45.	C <sub>16</sub> H <sub>33</sub>	CH <sub>3</sub>	17.0	53.96	55.03	52.61	54.06	600.9	612.4	585.6	594.4
46.	C <sub>15</sub> H <sub>31</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	17.0	53.96	55.03	52.61	54.83	600.9	612.4	585.6	601.7
47.	C <sub>17</sub> H <sub>35</sub>	CH <sub>3</sub>	18.0	55.29	56.77	53.43	55.29	614.5	630.3	593.2	606.1
48.	C <sub>16</sub> H <sub>33</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	18.0	55.29	56.77	53.43	56.15	614.5	630.3	593.2	614.8
49.	CH <sub>3</sub>	<i>i</i> -C <sub>3</sub> H <sub>7</sub>	3.5	29.40	29.16	29.20	29.89	345.2	342.5	342.9	345.1
50.	CH <sub>3</sub>	<i>s</i> -C <sub>4</sub> H <sub>9</sub>	4.5	31.99	31.63	31.73	32.27	372.7	368.9	369.8	370.3
51.	CH <sub>3</sub>	<i>i</i> -C <sub>4</sub> H <sub>9</sub>	4.5	32.26	31.63	31.73	32.75	375.6	368.9	369.8	375.6
52.	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	<i>i</i> -C <sub>3</sub> H <sub>7</sub>	4.5	31.58	31.63	31.73	32.27	368.4	368.9	369.8	370.3
53.	CH <sub>3</sub>	<i>t</i> -C <sub>4</sub> H <sub>9</sub>	4.0	30.43	30.43	30.48	31.01	356.2	356.0	356.5	356.1
54.	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	<i>t</i> -C <sub>4</sub> H <sub>9</sub>	5.0	34.54	32.84	32.94	33.31	399.7	381.7	382.7	381.9
55.	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	(CH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> CH(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	6.5	36.87	36.34	36.39	36.66	424.2	418.6	419.2	418.5
56.	<i>i</i> -C <sub>3</sub> H <sub>7</sub>	<i>i</i> -C <sub>4</sub> H <sub>9</sub>	6.0	36.87	35.21	35.27	35.53	424.2	406.8	407.4	406.3
57.	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	6.0	36.87	35.21	35.27	35.50	424.2	406.8	407.4	405.9
58.	<i>i</i> -C <sub>3</sub> H <sub>7</sub>	<i>t</i> -C <sub>4</sub> H <sub>9</sub>	5.5	36.87	34.03	34.12	34.42	424.2	394.3	395.2	394.1
59.	(CH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> CH(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub>	8.5	39.03	40.64	40.55	38.72	446.9	463.8	463.0	440.5
60.	<i>t</i> -C <sub>4</sub> H <sub>9</sub>	C <sub>4</sub> H <sub>9</sub>	7.0	39.03	37.46	37.48	37.59	446.9	430.4	430.7	428.5
61.	CH <sub>2</sub> (CH <sub>3</sub> )C(C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> ) <sub>2</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	8.0	39.03	39.47	39.56	38.72	446.9	451.5	452.5	440.5
62.	<i>t</i> -C <sub>4</sub> H <sub>9</sub>	<i>t</i> -C <sub>4</sub> H <sub>9</sub>	6.0	39.03	35.21	35.27	35.52	446.9	406.8	407.4	406.1
63.	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	C <sub>4</sub> H <sub>9</sub>	8.0	41.05	39.47	39.56	39.61	467.9	451.5	452.5	449.9
64.	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	C <sub>5</sub> H <sub>11</sub>	9.0	42.95	41.82	41.52	41.56	487.7	476.1	473.0	470.2

Примечание. А–В – расчетные методы ПУЦ1, ПУЦ2 и ACD/Lab 2014 соответственно. Курсивом отмечены расчетные данные из справочника <sup>18</sup>.

Сравнительный анализ расчетных методов

Параметр	Методы для $L_{HTK}$				Методы для $T_b$			
	А	Б	В	$\Gamma^{21}$	А	Б	В	$\Gamma^{21}$
$r$	0.9988	0.9992	0.9978	0.9839	0.9987	0.9992	0.9997	0.9994
RMSE	0.29	0.24	0.72	–	3.10	2.51	1.65	–
AARD	0.64	0.53	1.77	–	0.59	0.48	0.27	–
$\varepsilon_{cp}$	0.06	0.05	0.14	0.51	0.62	0.50	0.33	1.22
$\sigma$	0.25	0.21	0.62	0.59	2.70	2.20	1.48	1.41

Примечание. В работе <sup>21</sup> приведены только расчетные значения  $L_{HTK}$  и  $T_b$  только для алкинов  $C_9H_{16}$ , что не позволяет рассчитать ошибки RMSE и AARD для метода Г.

и температуры кипения алкинов. При этом методы ПУЦ1 и ПУЦ2 чуть лучше рассчитывают  $L_{HTK}$ , чем способы В и Г. В случае температуры кипения алкинов наблюдается обратная картина, но следует отметить, что методы ПУЦ1 и ПУЦ2 значительно проще аддитивно-групповой подхода Г и не требуют специального программного обеспечения в отличие от программного комплекса ACD/Lab 2014.

В настоящее время существует дисбаланс между синтезом новых веществ и накоплением базы данных по их свойствам. Развитие хемоинформатики и QSPR подхода, в частности, является быстрым и мало затратным вариантом ис-

правления данной ситуации. В результате проведенного исследования показано, что методы ПУЦ1 и ПУЦ2, которые ранее были апробированы для расчета показателей пожарной опасности различных классов органических соединений <sup>13–15</sup>, могут быть также использованы для прогнозирования их физико-химических свойств, что продемонстрировано на примере вычисления теплоты испарения при нормальной температуре и температуры кипения диалкилалкинов. Предложенный в настоящей работе подход может быть использован для прогнозирования  $L_{HTK}$  и  $T_b$  экспериментально еще неизученных диалкилацетиленов.

#### Литература

1. Brown F. K. Chapter 35. Chemoinformatics: what is it and how does it impact drug discovery // Ann. Rep. Chem.— 1998.— V.33.— Pp.375-384.
2. Handbook of Chemoinformatics. From Data to Knowledge in 4 Volumes / by ed. J. Gasteiger.— Weinheim: Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KgaA, 2003.— 1915 p.
3. Handbook of Chemoinformatics Algorithms / by ed. J.-L. Faulon, A. Bender.— Boca Raton: Taylor and Francis Group, LLC, 2010.— 434 p.
4. Chemoinformatics and Advanced Machine Learning Perspectives: Complex Computational Methods and Collaborative Techniques / by ed. H. Lodhi, Y. Yamanishi.— Hershey: IGI Global, 2011.— 419 p.
5. Advanced Methods and Applications in Chemoinformatics: Research Progress and New Applications / by ed. E. A. Castro, A. K. Haghi.— Hershey: IGI Global, 2012.— 513 p.
6. Gilani H. G., Samper K. G., Haghi R. K. Chemoinformatics. Advanced Control & Computational Techniques.— Toronto: Aple Academic Press, 2012.— 214 p.
7. Computational Approaches in Cheminformatics and Bioinformatics / by ed. R. Guha, A. Bender.— Hoboken: John Wiley & Sons, Inc., 2012.— 283 p.
8. Haghi A. K. Methodologies and Applications for Chemoinformatics and Chemical Engineering.— Hershey: IGI Global, 2013.— 479 p.

#### References

1. Brown F. K. [Chapter 35. Chemoinformatics: what is it and how does it impact drug discovery]. Ann. Rep. Chem., 1998, vol.33, pp.375-384. doi: 10.1016/S0065-7743(08)61100-8.
2. Gasteiger J. (ed.). [Handbook of Chemoinformatics. From Data to Knowledge in 4 Volumes]. Weinheim, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KgaA, 2003, 1915 p. doi: 10.1002/9783527618279.
3. Faulon J.-L., Bender A. (eds.). [Handbook of Chemoinformatics Algorithms]. Boca Raton, Taylor and Francis Group, LLC, 2010, 434 p.
4. Lodhi H., Yamanishi Y. (eds.). [Chemoinformatics and Advanced Machine Learning Perspectives: Complex Computational Methods and Collaborative Techniques]. Hershey, IGI Global, 2011, 419 p.
5. Castro E. A., Haghi A. K. (eds.). [Advanced Methods and Applications in Chemoinformatics: Research Progress and New Applications]. Hershey, IGI Global, 2012, 513 p.
6. Gilani H. G., Samper K. G., Haghi R. K. [Chemoinformatics. Advanced Control & Computational Techniques]. Toronto, Aple Academic Press, 2012, 214 p.
7. Guha R., Bender A. (eds.). [Computational Approaches in Cheminformatics and Bioinformatics]. Hoboken, John Wiley & Sons, Inc., 2012, 283 p. doi: 10.1002/9781118131411.
8. Haghi A. K. [Methodologies and Applications for Chemoinformatics and Chemical Engineering]. Hershey: IGI Global, 2013, 479 p.

9. Karthikeyan M., Vyas R. Practical Chemoinformatics.— New Delhi: Springer, 2014.— 546 p.
10. Applied Chemoinformatics: Achievements and Future Opportunities / by ed. T. Engel, J. Gasteiger.— Weinheim: Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2018.— 617 p.
11. Tutorials in Chemoinformatics / by ed. A. Varnek.— Hoboken: John Wiley & Sons Ltd, 2017.— 482 p.
12. Chemoinformatics: Basic Concepts and Methods / by ed. T. Engel, J. Gasteiger.— Weinheim: Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2018.— 608 p.
13. Алексеев С. Г., Барбин Н. М., Алексеев К. С., Орлов С. А. Связь показателей пожарной опасности с химическим строением. I. Алканола // Пожаровзрывобезопасность.— 2010.— Т.19.— №5.— С.23-30.
14. Алексеев К. С., Алексеев С. Г., Барбин Н. М. Связь показателей пожарной опасности с химическим строением. Часть XXII. Диалкилкарбонаты // Бутлеровские сообщения.— 2016.— Т.45, №1.— С.93-100.
15. Смирнов В. В., Алексеев С. Г., Барбин Н. М. Прогнозирование температуры вспышки диалкиламинов // Журн. Сиб. Фед. ун-та. Сер. химия.— 2016.— Т.9, №1.— С.68-77.
16. ACD/Labs Software. Version 2014 for Microsoft Windows. Installation guide. Installing and Registering ACD/Labs Software.— Toronto: Advanced Chemistry Development, 2014.— 52 p.
17. ACD/Boiling Point. Version for Microsoft Windows. User's guide. Calculating the Boiling Point, Vapor Pressure, and Related Properties.— Toronto: Advanced Chemistry Development, 2013.— 29 p.
18. Yaws C. L. Thermophysical Properties of Chemicals and Hydrocarbons.— Amsterdam: Gulf Professional Publishing, 2014.— 991 p.
19. Gharagheizia F., Ilani-Kashkouli P., Acree Jr. W. E., Mohammadia A. H., Ramjugernath D. A group contribution model for determining the vaporization enthalpy of organic compounds at the standard reference temperature of 298 K // Fluid Phase Equilibria.— 2013.— V.360.— Pp.279-292.
20. Смоляков В. М. Зависимость свойств органических веществ от строения их молекул: расчетно-теоретическое исследование: Автореф. ... д. хим. н.— Тверь, 1995.— 81 с. Режим доступа: <https://dlib.rsl.ru/01000024557> (26.04.2018).
21. Смоляков В. М., Гребешков В. В. Расчет свойств алкинов C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>-C<sub>9</sub>H<sub>16</sub> на основе аддитивности энергетических вкладов // Журн. физ. химии.— 2015.— Т.89, №5.— С.886-890.
9. Karthikeyan M., Vyas R. [Practical Chemoinformatics]. New Delhi, Springer, 2014, 546 p.
10. Engel T., Gasteiger J. (eds.). [Applied Chemoinformatics: Achievements and Future Opportunities]. Weinheim, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2018, 617 p.
11. Varnek A. [Tutorials in Chemoinformatics]. Hoboken, John Wiley & Sons Ltd, 2017, 482 p. doi: 10.1002/9781119161110.
12. Engel T., Gasteiger J. (eds.). [Chemoinformatics: Basic Concepts and Methods]. Weinheim, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2018, 608 p.
13. Alexeev S. G., Barbin N. M., Alexeev K. S., Orlov S. A. *Sviaz' pokazatelei pozharnoi opasnosti s khimicheskim stroeniem. I. Alkanoly* [Correlation of fire hazard characteristics with chemical structure. I. Alcohols] *Pozharovzryvobezopasnost'* [Fire and Explosion Safety], 2010, vol.19, no.5, pp.23-30.
14. Alexeev K. S., Alexeev S. G., Barbin N. M. [Correlation of fire hazard characteristics with chemical structure. Part XXII. Dialkyl carbonates]. *Butlerov Communications*, 2016, vol.45, no.1, pp.93-100.
15. Smirnov V. V., Alekseev S. G., Barbin N. M. *Prognozirovanie temperatury vspyshki dialkilaminov* [Prediction of the dialkylamine's flash points]. *Zhurnal Sibirskogo federal'nogo universiteta. Seriya khimiya* [J. Siberian Fed. Univ., Chem.], 2016, vol. 9, no. 1, pp. 68-77. doi: 10.17516/1998-2836-2016-9-1-68-77.
16. [ACD/Labs Software. Version 2014 for Microsoft Windows. Installation guide. Installing and Registering ACD/Labs Software]. Toronto, Advanced Chemistry Development, 2014, 52 p.
17. [ACD/Boiling Point. Version for Microsoft Windows. User's guide. Calculating the Boiling Point, Vapor Pressure, and Related Properties]. Toronto, Advanced Chemistry Development, 2013, 29 p.
18. Yaws C. L. [Thermophysical Properties of Chemicals and Hydrocarbons]. Amsterdam, Gulf Professional Publishing, 2014, 991 p.
19. Gharagheizia F., Ilani-Kashkouli P., Acree Jr. W. E., Mohammadia A. H., Ramjugernath D. [A group contribution model for determining the vaporization enthalpy of organic compounds at the standard reference temperature of 298 K]. *Fluid Phase Equilibria*, 2013, vol.360, pp.279-292. doi: 10.1016/j.fluid.2013.09.021.
20. Smoliakov V. M. *Zavisimost' svoistvo organicheskikh veshchestv ot stroeniya ikh molekul: raschetno-teoreticheskoe issledovanie. Avtoref. Dokt. khim. nauk* [Dependence of the properties of organic substances on the structure of their molecules: a computational and theoretical study. Dr. chem. sci. syn.]. Tver', 1995, 81 p.
21. Smolyakov V. M., Grebeshkov V. V. [Calculating the properties of C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>-C<sub>9</sub>H<sub>16</sub> alkynes, based on the additivity of energy contributions], *Russian J. Phys. Chem. A*, 2015, vol.89, no.5, pp.914-918. doi: 10.1134/S0036024415050295.