

Поиск дескрипторов для количественного описания хода химической эволюции.

В.И. Баранов, Л.А. Грибов, В.А. Дементьев

Предлагается несколько вариантов количественного описания степени сложности молекулярной структуры. Отобраны такие дескрипторы сложности, которые в совокупности с кинетическими показателями хода реакций в химической системе позволяют количественно оценить степень эволюционного развития системы. Множество вариантов этих дескрипторов необходимо для рассмотрения различных аспектов химической эволюции – возрастания или подавления склонности участников системы к вступлению в реакции, склонности к фотохимическим реакциям, склонности к образованию супрамолекулярных структур. Последнее особенно важно для отслеживания эволюционного перехода от мира сложных органических молекул к миру живого вещества.

Ключевые слова: усложнение структур молекул, ограничения на свободу движений объектов химического мира, дескрипторы сложности молекулярных структур, количественное описание эволюции.

Постановка задачи

Содержательное определение процесса эволюционного развития материи дано в монографии Э.М. Галимова [1]. Оно существенно отличается от весьма распространённого малосодержательного определения эволюции вообще – как развёртывания во времени любого изменения объектов материального, социального и духовного мира. В [1] впервые было предложено эволюцией называть самопроизвольное формирование более сложных по структуре и свойствам материальных объектов (их упорядочение) путём наложения ограничений на возможные движения более простых объектов. Такое определение эволюции как нельзя более подходит для описания процессов развития в физическом и химическом мире. В данной работе мы под эволюцией будем понимать только такие процессы.

Дальнейшее углубление понятия эволюции по Галимову было выполнено в работе [2]. Конкретизация механизмов эволюции органических молекул оказалась возможной на основе методов молекулярного моделирования [3 - 5]. В работе [6] выявлены общие черты закономерностей развития материи на этапах ядерной, атомной и молекулярной эволюции, вплоть до формирования супрамолекул. Там же найдены физические условия торможения эволюции в конце одного этапа и перехода к качественно новому этапу развития вещества.

Все эти рассмотрения особенностей течения эволюционного процесса проводились на качественном уровне. Однако на семинаре, посвященном проблемам эволюции ранней Земли и биосферы [7] Э.М. Галимов высказал предположение, что можно и должно выявить общий закон эволюционного движения материи. Естественно, закон должен носить количественный характер,

чтобы стать предсказательным инструментом науки. Такой закон пока не выявлен, но из определения эволюции по Галимову следует, что он должен оперировать с количественной характеристикой сложности структур материальных объектов.

В данной работе поставлена задача поиска подходящих характеристик сложности молекулярных структур с целью количественной оценки степени эволюционного развития вещества в его химических превращениях.

Имеется большой опыт количественного описания всех динамических особенностей сложных органических молекул [8]. Этот опыт распространяется не только на стационарные электронные и колебательные состояния молекул, но и на процессы химических превращений. Поэтому в принципе соответствующий вычислительный аппарат может быть использован для достижения поставленной здесь цели. Однако этот аппарат чрезвычайно сложен и громоздок сам по себе, следовательно он не может быть использован напрямую. Необходимо на основе этого аппарата сформировать интегральные обобщённые характеристики сложности молекулярных структур, удобные для быстрого отслеживания эволюционных особенностей эволюционных событий в мире молекул. Такие характеристики могут быть похожи на дескрипторы, которыми принято пользоваться в системе QSAR для отслеживания связей структура-активность молекул. Некоторое множество вариантов этих дескрипторов необходимо для рассмотрения различных аспектов химической эволюции – возрастания или подавления склонности участников системы к вступлению в реакции, склонности к фотохимическим реакциям, склонности к образованию супрамолекулярных структур. Последнее особенно важно для отслеживания эволюционного перехода от мира сложных органических молекул к миру живого вещества.

Предлагаются различные дескрипторы, интегрально отражающие различные физические и химические ценности объектов. Предполагается, что эти дескрипторы аддитивны. Можно воспользоваться кинетическими кривыми, как предлагается в [4], но нагруженными определённым дескриптором (концентрация компонента реакционной смеси умножается на величину дескриптора одной его молекулы). Тогда исследователь эволюции получит для конкретной химической системы наглядную количественную характеристику процесса во времени.

Стратегия поиска полезных и говорящих дескрипторов основана на представлениях наиболее прогрессивных эволюционистов биохимического уровня. Они считают, что цель химической эволюции – приобретение химическими объектами специфических функций [9]. Мы такие функции называем свойствами или активностями. Например, фермент обладает функцией распознавать только специфичный субстрат и катализировать только одну специфическую реакцию. И совершенно ясно, что такая функция может возникать только у объекта с очень сложной и оригинальной внутренней структурой. Как у высокомолекулярного белка. А простые углеводороды готовы участвовать в почти любых органических реакциях. Их функции – размыты.

Поэтому задача заключалась, в основном, в поиске характеристик сложности и уникальности химической структуры.

Описание дескрипторов

Дескриптор подвижности протонов на внешней поверхности молекулы

В равновесном состоянии подсчитываем момент инерции I_0 всех атомов Н в молекуле. Это норма тензора инерции протонной шубы молекулы в главных осях инерции данной шубы. Тяжелые атомы в этот расчёт не включаем, чтобы не затенять протонную часть I_0 большими вкладами от скелета молекулы.

Для каждого нормального колебания находим максимально смещённую конфигурацию всего коллектива протонов. Получаем новое значение I . Важно, что это значение зависит от смещений всех атомов молекулы. Протонная шуба послушно следует за колебаниями скелета и при этом колеблется сама.

Разница $\text{abs}(I - I_0)$ характеризует среднюю подвижность всех протонов в данном колебании. А это позволяет оценить усреднённую возможность молекулы вступать в различные органические реакции путём забрасывания какого-то из её протонов в новую потенциальную яму. Таковы представления [4] о физическом содержании акта химического превращения.

Дескриптор подсчитываем, суммируя изменения $\text{abs}(I - I_0)$ во всех нормальных колебаниях молекулы. Таким образом, в этот дескриптор входит вся сложность молекулярной структуры. Чем больше у молекулы нормальных колебаний, тем больше у неё шансов вступить в какую-то реакцию. Однако важна и самостоятельная подвижность каждого протона в каждом нормальном колебании. А тут возможны варианты. Например, в складчатой структуре глобулярного белка гидрофобные аминокислотные остатки обращены вовнутрь глобулы и не могут вступать в реакции с внешними агентами. Поэтому для таких аминокислотных остатков не имеет смысла подсчитывать их вклад в этот дескриптор. Но для протонов активного центра фермента – наоборот, следует учитывать подвижности всех атомов, обращенных вовнутрь полости активного центра.

Сложность графа валентных связей молекулы

Этот дескриптор напрямую связан со сложностью и с оригинальностью внутренней структуры молекулы. Его вычисляем так.

Для каждой координаты растяжения связи складываем обратные массы атомов, образующих связь, и умножаем на обратную длину этой связи. Эту характеристику делим на количество таких связей в графе молекулы. Затем находим сумму всех таких характеристик по всем связям молекулы.

Обратные массы атомов характеризуют подвижность данной связи в колебаниях. То есть имеют отдалённую связь с возможностью участвовать этой связи в химических превращениях. Обратная

длина связи характеризует важность этой связи в общей структуре молекулы. Одинаковость многих связей снижает степень оригинальности структуры. Например, сложность истинного кристалла близка к нулю, как и его эволюционные возможности.

Сложность системы естественных колебательных координат

В матрице T_p молекулы диагональный элемент, относящийся к растяжению связи, умножаем на обратную длину этой связи. Находим такие же связи и полученную характеристику делим на число этих связей. Диагональный элемент любой угловой координаты делим на число таких элементов. Полученные характеристики складываем. Получается общая характеристика сложности и оригинальности системы колебательных координат.

Ожидаем, что эти два последних дескриптора сработают особенно хорошо, когда будут подсчитаны для белка, образующего уже вторичную структуру путём включения немногочисленных серных мостиков и водородных связей между далёкими участками первичной структуры белка. А однородная система пептидных связей в скелете белка даст почти нулевой вклад в эти дескрипторы.

Активность в ИК спектре

Это сумма абсолютных интенсивностей по всем нормальным колебаниям молекулы.

Характеризует поведение молекулы в её контактах с внешней средой и с полем теплового излучения. Такая активность молекулы имеет отношение к фотохимии.

Результаты расчётов

Приводим результаты некоторых предварительных расчетов, выполненных на материале простых органических соединений. В таблице 1 приведены дескрипторы для отдельных соединений.

Таблица 1. Дескрипторы сложности структур изолированных органических молекул

Молекула	Брутто формула	Дескриптор подвижности Н	Сложность графа связей	Сложность vibr_coords	Активность в ИК
Водород	H ₂	3.72	2.18	2.18	0
H ₂ O мономер	H ₂ O	5.67	0.61	3.44	194.9
Метан	CH ₄	22.44	0.27	0.65	66.9
Этан	C ₂ H ₆	41.42	0.31	1.697	64.8
Этилен	C ₂ H ₄	23.30	0.42	4.57	67.6
Ацетилен	C ₂ H ₂	13.01	0.725	1.09	117.1
Пропан	C ₃ H ₈	63.86	0.79	5.35	109.4
Пропилен	C ₃ H ₆	53.2	2.27	18.37	95.1
Аллен	C ₃ H ₄	32.53	0.35	4.73	86.4
Метил-Ацетилен	C ₃ H ₄	34.5	1.79	3.56	86.5
Бутан	C ₄ H ₁₀	87.3	0.49	5.10	150
Изобутан	C ₄ H ₁₀	106.4	1.25	3.13	124.7
Метил-Аллен	C ₄ H ₁₀	74.2	0.93	12.0	110.5
Бутадиен	C ₄ H ₆	53.81	1.03	7.46	125.6
Диметил-Ацетилен	C ₄ H ₆	57.26	0.413	1.91	59.54
Трансбутен	C ₄ H ₈	73.66	0.94	4.396	99.75

Гексан	C ₆ H ₁₄	150.3	0.34	3.33	231.3
Циклогексан	C ₆ H ₁₂	129.8	0.11	0.61	240.8
Бензол	C ₆ H ₆	66.8	0.21	0.763	85.5
Толуол	C ₇ H ₈	94.9	0.732	3.7	102.6
Октан	C ₈ H ₁₈	141.8	0.139	3.29	282.4
ИзоОктан	C ₈ H ₁₈	202.3	0.079	0.49	184.1
Стирол	C ₈ H ₈	115.0	0.88	12.2	163.2
Дифенил	C ₁₂ H ₁₀	126.9	0.249	0.939	151.7
Циклогексил- Циклогексан	C ₁₂ H ₂₂	266.6	0.058	0.98	450.4

Обратим внимание на Октан и ИзоОктан. Первый используется в форме октанового числа владельцами приличных автомобилей. Он горит быстро, но не настолько быстро, чтобы взрываться в цилиндрах двигателей. Второй легко детонирует. Потому что вся его водородная шуба сшита очень компактно, вся выставлена напоказ окислителю. Загорается вся мгновенно. Получается взрыв. Дескриптор подвижности Н это как раз и отражает. Во всех остальных смыслах ИзоОктан проще Октана.

Однако, наша задача – посмотреть, что происходит со сложностью структур в процессе химических превращений. Мы не занимаемся сейчас химической кинетикой и не следим за динамикой эволюционных изменений химической системы. В таблице 2 приведены сравнения сложности исходных участников суммарной химической реакции со сложностью конечных продуктов.

Таблица 2. Изменение дескрипторов сложности молекул в химических превращениях

Реакция или итог цепи превращений	Формула	Дескриптор подвижности Н до и после реакции	Сложность графа связей	Сложность vibr_coords
Метан + Метан = Этан + Водород	CH ₄ + CH ₄ = C ₂ H ₆ + H ₂	44.88 45.14	0.54 2.49	1.30 3.877
Этан + Метан = Пропан + H ₂	C ₂ H ₆ + CH ₄ = C ₃ H ₈ + H ₂	63.86 67.58	0.58 2.97	2.347 7.53
Этилен + Метан = Пропилен+ H ₂	C ₂ H ₄ + CH ₄ = C ₃ H ₆ + H ₂	45.74 56.92	0.69 4.45	5.22 20.55
Ацетилен + Метан = Метил-Ацетилен+ H ₂	C ₂ H ₂ + CH ₄ = C ₃ H ₄ + H ₂	35.45 38.22	0.995 3.97	1.74 5.74
Метил-Ацетилен+ Метан = Диметил-Ацетилен+ H ₂	C ₃ H ₄ + CH ₄ = C ₄ H ₆ + H ₂	56.94 60.98	2.06 2.593	4.21 4.09
Ацетилен+ 2Метан= Диметил-Ацетилен+ 2H ₂	C ₂ H ₂ + 2 CH ₄ = C ₄ H ₆ + 2H ₂	57.89 64.7	1.265 4.773	1.95 6.27
Пропан+ Метан = Бутан + H ₂	C ₃ H ₈ + CH ₄ = C ₄ H ₁₀ + H ₂	86.3 91.02	1.06 2.67	6.0 7.28
Этан + Этан = Бутан + H ₂	C ₂ H ₆ + C ₂ H ₆ = C ₄ H ₁₀ + H ₂	82.84 91.02	0.62 2.67	3.39 7.28
Аллен+ Метан = Метил-Аллен + H ₂	C ₃ H ₄ + CH ₄ = C ₄ H ₆ + H ₂	54.97 77.92	0.62 3.11	5.38 14.18
2 Этилен = Бутадиен + H ₂	2 C ₂ H ₄ = C ₄ H ₆ + H ₂	46.6 57.53	0.84 3.21	9.14 9.64
Этилен + 2Метан =Трансбутен+2H ₂	C ₂ H ₄ +2 CH ₄ = C ₄ H ₈ + 2 H ₂	68.18 81.1	0.96 5.3	5.87 8.756
Пропан + Метан =	C ₃ H ₈ + CH ₄ =	86.3	1.06	6.0

Изобутан + H ₂	C ₄ H ₁₀ + H ₂	106.4	1.25	3.13
Пропан+ Пропан = Гексан + H ₂	C ₃ H ₈ + C ₃ H ₈ = C ₆ H ₁₄ + H ₂	127.72 154.02	1.58 2.52	10.7 5.51
Бутан+2 Метан = Гексан + H ₂	C ₄ H ₁₀ =2 CH ₄ = C ₆ H ₁₄ + H ₂	132.18 154.02	4.85 2.52	9.46 5.51
3 Этан = Гексан + 2H ₂	3 C ₂ H ₆ = C ₆ H ₁₄ + 2H ₂	124.26 157.74	0.93 4.7	5.09 7.69
2 Изобутан = ИзоОктан + H ₂	2 C ₄ H ₁₀ = C ₈ H ₁₈ + H ₂	212.8 206.02	2.50 2.259	6.26 2.67
2 Бутан = Октан + H ₂	2 C ₄ H ₁₀ = C ₈ H ₁₈ + H ₂	174.6 145.52	0.98 2.319	10.2 5.47
Бензол + Метан = Тoluол + H ₂	C ₆ H ₆ + CH ₄ = C ₇ H ₈ + H ₂	89.24 98.62	0.48 2.912	1.413 5.84
Гексан + Этан = Октан + H ₂	C ₆ H ₁₄ + C ₂ H ₆ = C ₈ H ₁₈ + H ₂	191.72 145.52	0.65 2.319	5.027 5.47
2 Пропан + Этан = Октан + 2 H ₂	2 C ₃ H ₈ + C ₂ H ₆ = C ₈ H ₁₈ + 2 H ₂	169.14 149.24	1.89 4.499	12.397 7.65
Бензол + Этилен = Стирол + H ₂	C ₆ H ₆ + C ₂ H ₄ = C ₈ H ₈ + H ₂	90.1 138.3	0.63 3.06	5.333 14.38
2 Бензол = Дифенил + H ₂	2 C ₆ H ₆ = C ₁₂ H ₁₀ + H ₂	133.6 130.62	0.42 2.429	1.526 3.119
2 Циклогексан = Циклогексил- Циклогексан + H ₂	2 C ₆ H ₁₂ = C ₁₂ H ₂₂ + H ₂	300.6 270.3	0.68 2.24	6.66 3.16

В таблице реакций обратим внимание на разные возможности построения сложной структуры из более простых. В работе [6] на качественном уровне показано, что Природа склонна использовать уже готовые сложные структуры для построения из них ещё более сложных объектов. Из мелких объектов крупный собирать значительно сложнее. Нам кажется, что дескрипторы сложности это наблюдение вполне подтверждают.

Фрагментный способ вычисления дескрипторов

В будущем, когда мы перейдём к структурам полипептидов и белков, будет нецелесообразно рассчитывать каждую сложную структуру и её колебательные состояния заново. Предлагаем воспользоваться разработанной ранее техникой фрагментного формирования колебательного уравнения сложной молекулы и распространить эту технику на процесс вычисления дескрипторов.

Для опробования этой идеи заготовим фрагменты сложной молекулы. Пусть это искусственные структуры, но их тоже можно характеризовать с помощью дескрипторов. Затем соединим фрагменты с помощью стандартных программ. Возникает структура, где есть все колебательные координаты, кроме координат относительного вращения фрагментов вокруг общей связи. Эту координату можно при желании восстановить. Тогда описанным выше способом можно точно подсчитать дескрипторы конечной сложной структуры. Но можно выполнить приближенный расчет без учета внутреннего относительного вращения фрагментов в конечной структуре. Сравним эти дескрипторы с результатом простого суммирования дескрипторов отдельных фрагментов, вошедших в конечную структуру.

В таблице 3 приведены результаты такого сравнения.

Таблица 3. Дескрипторы фрагментов и готовых молекул, составленных из фрагментов.

Молекула	Брутто формула	Дескриптор подвижности Н	Сложность графа связей	Сложность vibr_coords	Активность в ИК
Метил	C_2H_3	18.4	0.49	1.64	31.4
Винил	C_3H_3	21.4	0.64	10.1	87.2
Фенил	C_7H_5	54.5	0.37	1.75	73.9
Толуол без вращения метила	C_7H_8	94.2	0.73	3.26	107.1
Толуол с вращением метила	C_7H_8	94.9	0.73	3.7	102.6
Стирол без вращения винила	C_8H_8	111.9	0.88	11.74	163.3
Стирол с вращением винила	C_8H_8	115.0	0.88	12.2	163.2

Из таблицы 3 видно, что идея фрагментного вычисления дескрипторов себя вполне оправдывает, если фрагменты обладают существенно различными внутренними структурами. При соединении однородных фрагментов дескрипторы сложности графа связей и сложности колебательных координат будут приобретать завышенные значения, поскольку не будет учтена повторяемость одинаковых связей в конечной структуре. Но эту трудность легко обойти путём небольшого усложнения программ расчёта дескрипторов.

Дескрипторы олигомеров воды

В данной серии расчётов мы ищем путь к реально сложным химическим соединениям, вплоть до белков с их вторичной структурой. В белковой α -спирали витки пептидного скелета прочно скрепляются в регулярную структуру путём их соединения водородными связями. И нам следует учесть физические и химические черты поведения водородной связи.

Выясняется, что даже при широких размахах протона, входящего в водородную связь, он очень неохотно вступает в реакции с внешними молекулами. Просто потому, что он связан, заперт внутри молекулы. А не выступает наружу, как в водородной шубе любого углеводорода.

В углеводородах мы рассчитывали дескриптор подвижности всех атомов Н во всех колебаниях молекулы. Это давало обобщённое представление о реакционном потенциале молекулы – во всех возможных реакциях присоединения или изомеризации. В соответствии с [8], эта подвижность протонов имеет отношение и к реакциям распада.

Но в соединениях с водородными связями мы исключим протоны этих связей из подсчета указанного дескриптора. Оставляем в расчёте только внешние протоны, готовые вступать в различные реакции.

Остальные дескрипторы подсчитаны теми же способами, как и в углеводородах.

При описании поведения дескрипторов в «реакциях» олигомеризации воды тоже есть одна особенность, отраженная в таблицах. Когда молекула воды после столкновения входит в ассоциат, вонне ничего, кроме энергии связи, не выделяется. Поэтому формулы реакций в таблице выглядят проще, чем в таблице для углеводородов, где при соединении двух молекул в более крупную обязательно выделяется молекула H_2 .

Из приведенных таблиц видно, что дескрипторы ведут себя несколько прихотливо. Это совершенно понятно, поскольку способы присоединения следующей молекулы воды к ассоциату не всегда одинаковы. В целом, из всех серий проделанных расчётов (углеводороды и олигомеры воды) видно, что разные дескрипторы ведут себя разумно и с разных сторон позволяют оценить эволюционную ценность как веществ, так и реакций с участием этих веществ.

Заметим, что спектр воды при олигомеризации изменяется в далёкой области по сравнению со спектром димера, входящего в состав плотной воды или льда. Дело в том, что координаты изломов линейных участков водородных связей и неплоские координаты отвечают за довольно широкие размахи протонов в водородных связях и в поворотных колебаниях внешних групп H_2O . В плотной воде такие широкие колебания наталкиваются на стерические затруднения. Сейчас же мы строим модели, годящиеся для описания явлений в разреженных парах воды, где почти свободно летают олигомеры. Для построения дескрипторов эволюционного поведения ассоциатов воды эти модели более адекватны, поскольку лёд является кристаллом. А рост кристалла не имеет никакого отношения к эволюции по Галимову.

Таблица 4. Дескрипторы воды и её олигомеров.

Молекула	Брутто формула	Дескриптор подвижности Н без водородных связей	Сложность графа связей	Сложность vibr_coords	Активность в ИК
H_2O мономер	H_2O	5.67	0.61	3.44	194.9
H_2O димер	$(H_2O)_2$	29.9	0.95	6.61	586.1
H_2O тример	$(H_2O)_3$	47.1	0.53	3.59	905.4
H_2O тетрамер	$(H_2O)_4$	79.5	0.37	2.61	1129
H_2O пентамер	$(H_2O)_5$	97.8	0.28	2.85	1353

Таблица 5. Поведение Дескрипторов воды и её олигомеров в процессах олигомеризации.

Реакция	Формула	Дескриптор	Сложность	Сложность	Активность
---------	---------	------------	-----------	-----------	------------

		подвижности Н до и после реакции	графа связей	vibr_coords	в ИК
2 H ₂ O мономер = H ₂ O димер	H ₂ O + H ₂ O = (H ₂ O) ₂	11.34 29.9	1.22 0.95	6.88 6.61	389.8 586.1
H ₂ O димер + H ₂ O = H ₂ O тример	(H ₂ O) ₂ + H ₂ O = (H ₂ O) ₃	35.57 47.1	1.56 0.53	10.1 3.59	781 905.4
H ₂ O тример + H ₂ O = H ₂ O тетрамер	(H ₂ O) ₃ + H ₂ O = (H ₂ O) ₄	52.77 79.5	1.14 0.37	7.03 2.61	1100 1129
H ₂ O тетрамер + H ₂ O = H ₂ O пентамер	(H ₂ O) ₄ + H ₂ O = (H ₂ O) ₅	85.17 97.8	0.98 0.28	6.05 2.85	1323.9 1353

Из таблиц 4 и 5 видно, что поведение дескрипторов при олигомеризации воды вполне предсказуемо, поскольку сложность этих простых соединений можно оценить на взгляд.

Приближенный расчёт дескрипторов

При переходе к основной задаче – к оценке сложности белковых структур – придётся иметь дело с 20 различными структурами аминокислотных остатков. У нас нет точных данных о силовых полях этих разнообразных соединений. Поэтому мы вынуждены ограничиться приближенными оценками частот колебаний и смещений атомов в этих соединениях. Имеет смысл проверить, насколько мы будем ошибаться в оценках дескрипторов, если будем заимствовать координаты атомов из данных, полученных средствами программ ChemOffice. Силовые же постоянные назначать только диагональным клеткам матриц U_q , ориентируясь на полученные Барановым корреляции между длиной связи и значением силовой постоянной. Проверку проведём на материале уже исследованных соединений. Сравним точные значения дескрипторов из таблицы 1 с приближенными значениями.

Таблица 6. Точное и приближенное значение дескрипторов

Молекула	Брутто формула	Дескриптор подвижности Н		Сложность графа связей		Сложность vibr_coords		Активность в ИК	
Метан	CH ₄	22.44	24.67	0.27	0.27	0.65	0.65	66.9	81
Этан	C ₂ H ₆	41.42	42.62	0.31	0.31	1.69	1.69	64.8	94.2
Этилен	C ₂ H ₄	23.30	26.4	0.42		4.57		67.6	102
Ацетилен	C ₂ H ₂	13.01	13.03	0.725		1.09		117.1	113
Пропан	C ₃ H ₈	63.86	65.7	0.79		5.35		109.4	123
Пропилен	C ₃ H ₆	53.2	54.6	2.27		18.37		95.1	125
Аллен	C ₃ H ₄	32.53	36.36	0.35		4.73		86.4	99.3
Метил-Ацетилен	C ₃ H ₄	34.5	39	1.79		3.56		86.5	100
Октан	C ₈ H ₁₈	141.8	147.7	0.139		3.29		282.4	288.7
ИзоОктан	C ₈ H ₁₈	202.3	209.7	0.079		0.49		184.1	295

На примере соединений, приведенных в таблице 6, видно, что точный и приближенный расчёт дескриптора подвижности атомов Н дают очень близкие значения. Активность соединений в ИК спектрах в приближенном расчёте оценивается значительно хуже. Поэтому в сложных

соединениях приближенный расчёт этого дескриптора окажется менее пригодным для анализа сложности их поведения в электромагнитных полях. Дескрипторы сложности системы связей и колебательных координат всегда подсчитываются точно, поскольку их значения не зависят от силового и электрооптического полей молекулы. Следовательно, переходя к анализу таких сложных соединений, как белки, мы можем пользоваться весьма приближенными расчётами трёх дескрипторов для оценки сложности этих соединений.

Заключение

В работе на примере дескрипторов простых органических соединений олигомеров воды и показано, что эволюционное развитие химической системы вполне может быть количественно оценено с помощью обобщенных интегральных дескрипторов. Простые молекулярные структуры по своей сложности легко оцениваются на взгляд. И дескрипторы в своём поведении не противоречат мнению специалиста об относительных изменениях сложности молекул в химических превращениях. Это позволяет надеяться на пользу подобных дескрипторов в деле количественного описания эволюции химического мира.

Литература

1. Э.М. Галимов. Феномен жизни. Между равновесием и нелинейностью. Происхождение и принципы эволюции. М. URSS, 2001.
2. E.M. Galimov. Concept of Sustained ordering and ATP-related mechanism of life's origin. Inter. Jour. Mol. Sci., 2009, 10, 2019-2030.
3. В.А. Дементьев. Компьютерное моделирование процесса возникновения генетического кода. В сборнике «Проблемы зарождения и эволюции биосферы» под ред. Э.М. Галимова, М., URSS, 2008, 79-94.
4. Л.А. Грибов, В.И. Баранов. От молекул к жизни. М. URSS, 2012.
5. В.А. Дементьев. Некоторые вопросы химической эволюции, решаемые средствами молекулярного моделирования. В сборнике «Проблемы зарождения и эволюции биосферы» под ред. Э.М. Галимова, том 2. М., URSS, 2013, 265-285.
6. V.A. Dement'ev. The Driving Forces of Evolution. ISSN 0016_7029, Geochemistry International, 2014, Vol. 52, No. 13, pp. 1146–1189. © Pleiades Publishing, Ltd., 2014.
7. Биомолекулы и супрамолекулярные системы в предбиологической эволюции. Казань, 17-18 июня 2010.
8. Л.А. Грибов, В.И. Баранов. Теория и методы расчета молекулярных процессов, М., URSS, 2006.
9. А. П.Малышкин. Адаптивный иммунитет: концепция сцепленных функций. Immunology Innovation, ISSN 2053-213X, 2013.