ЖУРНАЛ ФИЗИЧЕСКОЙ ХИМИИ, 2023, том 97, № 10, с. 1393–1397

ХИМИЧЕСКАЯ ТЕРМОДИНАМИКА И ТЕРМОХИМИЯ

УДК 541:544.43

ИНФОРМАЦИОННАЯ ЭНТРОПИЯ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ И НЕЗАВИСИМЫХ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ

© 2023 г. А. Д. Зимина[a], И. С. Шепелевич[a], Д. Ш. Сабиров[a,*]

[a] *Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН, 450075 Уфа, Россия*

*****e-mail: diozno@mail.ru*

Поступила в редакцию 05.04.2023 г.
После доработки 11.04.2023 г.
Принята к публикации 13.04.2023 г.

В задачах математической химии химическая реакция представляется как трансформация одного молекулярного ансамбля в другой, а для количественного описания изменения сложности молекул часто используется информационная энтропия и связанные с ней параметры. Информационная энтропия химической реакции рассчитывается как разность значений, соответствующих ансамблю продуктов и ансамблю реагентов. Ранее нами было показано, что информационная энтропия молекулярных ансамблей зависит не только от информационной энтропии отдельных молекул, но и от кооперативной энтропии – эмерджентного параметра, возникающего при объединении молекул в ансамбль. Учет этого параметра обуславливает особенности вычисления информационной энтропии для взаимосвязанных химических реакций. В статье рассмотрены системы независимых и параллельных химических реакций и выведена аналитическая зависимость, связывающая информационную энтропию суммарного процесса с параметрами отдельных реакций.

Ключевые слова: информационная энтропия, кооперативная энтропия, молекулярный ансамбль, параллельные реакции, независимые реакции

DOI: 10.31857/S0044453723100291, **EDN:** HARXZC

ВВЕДЕНИЕ

Информационно-теоретические индексы – распространенный класс структурных дескрипторов [1–4], которые используются для количественного описания сложности строения химических соединений – молекул [5–11], кристаллов [12–21], наноструктур регулярного строения [22–26] (в том числе, дендримеров [27, 28]). Для вычисления информационно-теоретических индексов анализируется молекулярный граф химического соединения с тем, чтобы разбить множество его атомов-вершин на подмножества эквивалентных (химически идентичных) атомов, а статистические веса подмножеств используются для вычисления информационной энтропии (h). В таком подходе молекулы, содержащие большие группы химически эквивалентных атомов (например, высокосимметричные молекулы) получают меньшие значения h и наоборот [2, 4, 19].

Далее полученные дескрипторы обычно используются для поиска корреляций “структура–свойство”/“структура–активность” [4–8] и классификации молекул [29–31] и минералов [12–18]. Вместе с тем, возможно применение информационной энтропии для описания химических и физико-химических процессов [32–42]. Отметим здесь первую работу Каррмана [32] по применению информационной энтропии для анализа изменений молекулярных графов и пионерские работы Н.И. Кобозева, посвященные термодинамическим моделям процессов изменения информационной энтропии и изучению каталитических реакций с использованием информационно-теоретического аппарата [33–35]. В наших работах информационная энтропия применялась для описания процессов образования фуллеренов [9, 36] и эндофуллеренов [37, 38]. Нами было показано, что для корректного вычисления информационной энтропии химической реакции необходимо учитывать индексы h_i участников реакций, а также кооперативную энтропию (H_Ω) ансамблей продуктов и реагентов – эмерджентный параметр, отражающий факт смешения молекул и зависящий только от их размера [43–45]. Таких дополнительных слагаемых не появляется при вычислении термодинамических параметров реакции (например, теплового эффекта) [46].

Введение дополнительного слагаемого H_Ω позволяет избегать контринтуитивных оценок сложности молекулярных ансамблей [43, 44]. Отме-

тим, что аналогичное слагаемое появляется в теории квантовой информации при описании энтропии фон Неймана связанных систем [47–49]. Появление H_Ω в описании химических реакций, с одной стороны, позволяет оценить раздельно изменения молекулярной сложности, связанные с изменением размера и строения молекул [45]. С другой стороны, применение подхода к различным схемам, включающим несколько химических реакций, имеет особенности, поскольку для информационной энтропии в системе взаимосвязанных реакций в общем случае закон Гесса не выполняется [43–45]. Вместе с тем, именно анализ сложных химических превращений представляет интерес для современной цифровой химии [50, 51].

Ранее мы вывели аналитическую зависимость между элементарными стадиями простейшей каталитической реакции и ее некаталитическим вариантом [52]. Настоящая работа посвящена информационной энтропии параллельных и независимых химических реакций.

ОСНОВЫ РАЗВИВАЕМОГО ПОДХОДА

В основе подхода лежит понятие молекулярного ансамбля, введенного Уги и Гиллеспи [53], как совокупности совместно рассматриваемых молекул. Если известны значения информационной энтропии молекул ансамбля h_i и их размер (количество атомов в молекуле N_i), информационная энтропия n-молекулярного ансамбля вычисляется как [43]:

$$h_{\mathrm{ME}} = \sum_{i=1}^{n} \omega_i h_i + H_\Omega, \qquad (1)$$

где ω_i – доля атомов ансамбля, приходящаяся на i-ю молекулу:

$$\omega_i = \frac{N_i}{\sum_{i=1}^{n} N_i}. \qquad (2)$$

Кооперативная энтропия рассчитывается по формуле:

$$H_\Omega = -\sum_{i=1}^{n} \omega_i \lg \omega_i \qquad (3)$$

и отражает факт смешения молекул; $H_\Omega = 0$ для мономолекулярных ансамблей. В уравнениях (1) и (3) может использоваться логарифм по любому основанию. Удобно использовать логарифмы по основаниям 2 и e, что позволяет выразить все величины в битах и натах соответственно [2].

В развиваемом подходе химическая реакция представляется как превращение одного молекулярного ансамбля в другой, а соответствующее изменение информационной энтропии Δh_{R} есть разница между значениями h_{ME} для ансамблей продуктов и реагентов или с учетом уравнения:

$$\Delta h_{\mathrm{R}} = \sum_{\mathrm{prod}} \omega_i h_i - \sum_{\mathrm{react}} \omega_j h_j + H_\Omega^{\mathrm{prod}} - H_\Omega^{\mathrm{react}}. \qquad (4)$$

Особенности применения информационно-теоретического подхода к молекулам, молекулярным ансамблям и одностадийным химическим процессам изложены в наших предыдущих работах [43–45].

ВЫВОД АНАЛИТИЧЕСКОЙ ЗАВИСИМОСТИ И ЕЕ ОБСУЖДЕНИЕ

Рассмотрим схему из двух независимых химических реакций:

$$\sum_{i=1}^{n} \mathrm{R}_i^{(\mathrm{I})} \rightarrow \sum_{j=1}^{m} \mathrm{P}_j^{(\mathrm{I})}, \quad \sum_{i=1}^{p} \mathrm{R}_i^{(\mathrm{II})} \rightarrow \sum_{j=1}^{q} \mathrm{P}_j^{(\mathrm{II})}. \qquad (5)$$

Здесь и далее величины, связанные с первой и второй реакциями, обозначаются индексами I и II; через R и P обозначены реагенты и продукты. Согласно уравнению (4) изменение информационной энтропии в реакциях (5) рассчитывается как:

$$\begin{aligned} \Delta h_{\mathrm{R(I)}} &= \sum_{j=1}^{m} \omega_j^{(\mathrm{I})} h(\mathrm{P}_j^{(\mathrm{I})}) - \sum_{i=1}^{n} \omega_i^{(\mathrm{I})} h(\mathrm{R}_i^{(\mathrm{I})}) + \\ &+ H_\Omega^{\mathrm{P(I)}} - H_\Omega^{\mathrm{R(I)}}, \\ \Delta h_{\mathrm{R(II)}} &= \sum_{j=1}^{q} \omega_j^{(\mathrm{II})} h(\mathrm{P}_j^{(\mathrm{II})}) - \sum_{i=1}^{p} \omega_i^{(\mathrm{II})} h(\mathrm{R}_i^{(\mathrm{II})}) + \\ &+ H_\Omega^{\mathrm{P(II)}} - H_\Omega^{\mathrm{R(II)}}. \end{aligned} \qquad (6)$$

В выражениях (6) (I) и (II) указывают на то, к какому из ансамблей относятся доли ω. Например:

$$\omega_j^{(\mathrm{I})}(\mathrm{R}_i^{(\mathrm{I})}) = \frac{N(\mathrm{R}_i^{(\mathrm{I})})}{\sum_{i=1}^{n} N(\mathrm{R}_i^{(\mathrm{I})})} \qquad (7)$$

обозначает долю атомов, приходящуюся на вещество R_i в молекулярном ансамбле реагентов I-й реакции. При этом выполняются условия сохранения материального баланса:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{n} N(\mathrm{R}_i^{(\mathrm{I})}) &= \sum_{j=1}^{m} N(\mathrm{P}_j^{(\mathrm{I})}), \\ \sum_{i=1}^{p} N(\mathrm{R}_i^{(\mathrm{II})}) &= \sum_{j=1}^{q} N(\mathrm{P}_j^{(\mathrm{II})}). \end{aligned} \qquad (8)$$

Суммарный процесс, включающий независимые реакции I и II:

$$\sum_{i=1}^{n} \mathrm{R}_i^{(\mathrm{I})} + \sum_{i=1}^{p} \mathrm{R}_i^{(\mathrm{II})} \to \sum_{j=1}^{m} \mathrm{P}_j^{(\mathrm{I})} + \sum_{j=1}^{q} \mathrm{P}_j^{(\mathrm{II})} \qquad (9)$$

характеризуется следующим изменением информационной энтропии:

$$\Delta h_{\mathrm{R}} = \sum_{j=1}^{m} \omega_j h(\mathrm{P}_j^{(\mathrm{I})}) + \sum_{j=1}^{q} \omega_j h(\mathrm{P}_j^{(\mathrm{II})}) - \sum_{i=1}^{n} \omega_i h(\mathrm{R}_i^{(\mathrm{I})}) - \sum_{i=1}^{p} \omega_i h(\mathrm{R}_i^{(\mathrm{II})}) + H_{\Omega}^{\mathrm{P}} - H_{\Omega}^{\mathrm{R}}. \qquad (10)$$

В выражении (10) фигурируют доли атомов, приходящиеся на молекулы участников реакции в обобщенных ансамблях продуктов и реагентов, например:

$$\omega_i(\mathrm{R}_i^{(\mathrm{I})}) = \frac{N(\mathrm{R}_i^{(\mathrm{I})})}{\sum_{i=1}^{n} N(\mathrm{R}_i^{(\mathrm{I})}) + \sum_{i=1}^{p} N(\mathrm{R}_i^{(\mathrm{II})})} = \frac{N(\mathrm{R}_i^{(\mathrm{I})})}{\sum_{j=1}^{m} N(\mathrm{P}_j^{(\mathrm{I})}) + \sum_{j=1}^{q} N(\mathrm{P}_j^{(\mathrm{II})})}. \qquad (11)$$

Укажем здесь на различия в кооперативной энтропии для отдельных процессов (5) и суммарного процесса (9). Например, для ансамбля продуктов:

$$H_{\Omega}^{\mathrm{P(I)}} = -\sum_{j=1}^{m} \omega_j^{(\mathrm{I})}(\mathrm{P}_j^{(\mathrm{I})}) \log \omega_j^{(\mathrm{I})}(\mathrm{P}_j^{(\mathrm{I})}), \qquad (12)$$

$$H_{\Omega}^{\mathrm{P}} = -\sum_{j=1}^{m} \omega_j(\mathrm{P}_j^{(\mathrm{I})}) \log \omega_j(\mathrm{P}_j^{(\mathrm{I})}) - \sum_{j=1}^{q} \omega_j(\mathrm{P}_j^{(\mathrm{II})}) \log \omega_j(\mathrm{P}_j^{(\mathrm{II})}). \qquad (13)$$

Для долей, используемых в выражениях (12) и (13), верны следующие соотношения:

$$\sum_{j=1}^{m} \omega_j^{(\mathrm{I})} = \sum_{j=1}^{q} \omega_j^{(\mathrm{II})} = \sum_{i=1}^{n} \omega_i^{(\mathrm{I})} = \sum_{i=1}^{p} \omega_i^{(\mathrm{II})} = 1, \qquad (14)$$

$$\sum_{j=1}^{m+q} \omega_j = \sum_{i=1}^{n+p} \omega_i = 1. \qquad (15)$$

Обозначим долю атомов ансамбля участников I-й реакции в обобщенном ансамбле (аналогично – для II-й реакции) как ω_{I}:

$$\omega_{\mathrm{I}} = \frac{\sum_{i=1}^{n} N(\mathrm{R}_i^{(\mathrm{I})})}{\sum_{i=1}^{n} N(\mathrm{R}_i^{(\mathrm{I})}) + \sum_{i=1}^{p} N(\mathrm{R}_i^{(\mathrm{II})})} = \frac{\sum_{j=1}^{m} N(\mathrm{P}_j^{(\mathrm{I})})}{\sum_{i=1}^{m} N(\mathrm{P}_i^{(\mathrm{I})}) + \sum_{i=1}^{q} N(\mathrm{P}_i^{(\mathrm{II})})}. \qquad (16)$$

Сравнивая выражения (7) и (11), нетрудно заметить, что

$$\omega_j = \omega_{\mathrm{I}} \omega_j^{(\mathrm{I})}. \qquad (17)$$

Ранее нами были установлены закономерности изменения кооперативной энтропии при объединении молекулярных ансамблей [47]. Используя выводы работы [47], можно установить связь между H_{Ω}^{P} из уравнения (10) и $H_{\Omega}^{\mathrm{P(I)}}$ и $H_{\Omega}^{\mathrm{P(II)}}$ из уравнений (6):

$$H_{\Omega}^{\mathrm{P}} = H_{\Omega}^{\mathrm{P(I)+P(II)}} + \omega_{\mathrm{I}} H_{\Omega}^{\mathrm{P(I)}} + \omega_{\mathrm{II}} H_{\Omega}^{\mathrm{P(II)}}. \qquad (18)$$

Аналогично имеем:

$$H_{\Omega}^{\mathrm{R}} = H_{\Omega}^{\mathrm{R(I)+R(II)}} + \omega_{\mathrm{I}} H_{\Omega}^{\mathrm{R(I)}} + \omega_{\mathrm{II}} H_{\Omega}^{\mathrm{R(II)}}. \qquad (19)$$

Из равенств (8) следует, что

$$H_{\Omega}^{\mathrm{P(I)+P(II)}} = H_{\Omega}^{\mathrm{R(I)+R(II)}} = -\omega_{\mathrm{I}} \log \omega_{\mathrm{I}} - \omega_{\mathrm{II}} \log \omega_{\mathrm{II}}. \qquad (20)$$

Перепишем уравнение (10) с учетом выражений (17), (18) и (19):

$$\Delta h_{\mathrm{R}} = \omega_{\mathrm{I}} \sum_{j=1}^{m} \omega_j^{(\mathrm{I})} h(\mathrm{P}_j^{(\mathrm{I})}) + \omega_{\mathrm{II}} \sum_{j=1}^{q} \omega_j^{(\mathrm{II})} h(\mathrm{P}_j^{(\mathrm{II})}) - \omega_{\mathrm{I}} \sum_{i=1}^{n} \omega_i^{(\mathrm{I})} h(\mathrm{R}_i^{(\mathrm{I})}) - \omega_{\mathrm{II}} \sum_{i=1}^{p} \omega_i^{(\mathrm{II})} h(\mathrm{R}_i^{(\mathrm{II})}) + H_{\Omega}^{\mathrm{P(I)+P(II)}} + \omega_{\mathrm{I}} H_{\Omega}^{\mathrm{P(I)}} + \omega_{\mathrm{II}} H_{\Omega}^{\mathrm{P(II)}} - H_{\Omega}^{\mathrm{R(I)+R(II)}} - \omega_{\mathrm{I}} H_{\Omega}^{\mathrm{R(I)}} - \omega_{\mathrm{II}} H_{\Omega}^{\mathrm{R(II)}}. \qquad (21)$$

Сгруппировав слагаемые, с учетом равенства (20) получим:

$$\Delta h_{\mathrm{R}} = \omega_{\mathrm{I}} \left[\sum_{j=1}^{m} \omega_j^{(\mathrm{I})} h(\mathrm{P}_j^{(\mathrm{I})}) - \omega_{\mathrm{I}} \sum_{i=1}^{n} \omega_i^{(\mathrm{I})} h(\mathrm{R}_i^{(\mathrm{I})}) + H_{\Omega}^{\mathrm{P(I)}} - H_{\Omega}^{\mathrm{R(I)}} \right] + \omega_{\mathrm{II}} \left[\sum_{j=1}^{q} \omega_j^{(\mathrm{II})} h(\mathrm{P}_j^{(\mathrm{II})}) - \omega_{\mathrm{I}} \sum_{i=1}^{p} \omega_i^{(\mathrm{II})} h(\mathrm{R}_i^{(\mathrm{II})}) + H_{\Omega}^{\mathrm{P(II)}} - H_{\Omega}^{\mathrm{R(II)}} \right]. \qquad (22)$$

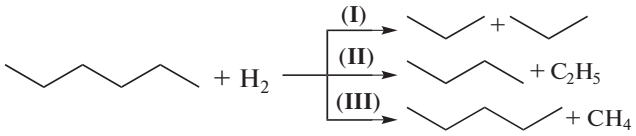

Рис. 1. Параллельные химические реакции *н*-гексана с водородом.

В квадратных скобках выражения (22) мы имеем $\Delta h_{R(I)}$ и $\Delta h_{R(II)}$ (см. уравнения (6)), и оно упрощается до:

$$\Delta h_R = \omega_I \Delta h_{R(I)} + \omega_{II} \Delta h_{R(II)}. \quad (23)$$

Рассматривая аналогичным способом систему n независимых химических реакций, можно получить:

$$\Delta h_R = \sum_{i=1}^{n} \omega_i \Delta h_{R(i)}, \quad (24)$$

где $\omega_{\underline{i}}$ – доли атомов, приходящиеся на участников $\underline{i}$-й реакции.

Система параллельных химических реакций отличается от рассмотренного выше случая только тем, что во всех реакциях исходные вещества идентичны, т.е. $R_i^{(I)} \equiv R_i^{(II)}$ в уравнениях (5). Это означает, что молекулярные ансамбли, связанные с каждой реакцией, будут иметь одинаковый размер, а соответствующие молекулярные ансамбли – одинаковые доли в обобщенном ансамбле. С учетом этого формулы (23) и (24) для системы двух и n параллельных химических реакций примут вид:

$$\Delta h_R = 0.5(\Delta h_{R(I)} + \Delta h_{R(II)}), \quad (25)$$

$$\Delta h_R = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \Delta h_{R(i)}. \quad (26)$$

Таблица 1. Ключевые информационно-энтропийные параметры модельных химических реакций (бит)

Уравнение реакции (обозначение)	H_Ω^{react}	H_Ω^{prod}	Δh_R
$C_6H_{14} + H_2 \rightarrow 2C_3H_8$ (I)	0.439	1.000	0.023
$C_6H_{14} + H_2 \rightarrow C_2H_6 + C_4H_{10}$ (II)	0.439	0.946	–0.250
$C_6H_{14} + H_2 \rightarrow CH_4 + C_5H_{12}$ (III)	0.439	0.773	0.092
$2C_6H_{14} + 2H_2 \rightarrow C_2H_6 + 2C_3H_8 + C_4H_{10}$ (Σ1)	1.439	1.973	–0.113
$3C_6H_{14} + 3H_2 \rightarrow CH_4 + C_2H_6 + 2C_3H_8 + C_4H_{10} + C_5H_{12}$ (Σ2)	2.024	2.491	–0.045

Примечание. Значения информационной энтропии молекул (h_i) для расчетов по уравнению (4) взяты из предыдущих работ [8, 43]: H_2 – 0, CH_4 – 0.722, C_2H_6 – 0.811, C_3H_8 – 1.686, C_4H_{10} – 1.842, C_5H_{12} – 2.352, C_6H_{14} – 2.446 бит.

Продемонстрируем выполнение последних соотношений на примере модельных химических реакций *н*-гексана с молекулярным водородом [54], сопровождающихся симметричным и несимметричным расщеплением углеродного скелета молекулы (рисунок 1). Мы рассчитали значения Δh_R по уравнению (4) для трех параллельных реакций и их сумм Σ1 = (I) + (II) и Σ2 = (I) + (II) + + (III) (таблица 1). Из таблицы можно найти, что $\Delta h_{R(\Sigma 1)} = 1/2(\Delta h_{R(I)} + \Delta h_{R(II)})$ и $\Delta h_{R(\Sigma 2)} = 1/3(\Delta h_{R(I)} + \Delta h_{R(II)} + \Delta h_{R(III)})$, т.е. соотношение (26) выполняется.

Приведенный выше пример демонстрирует отличие математических операций с информационно-энтропийными параметрами реакций от термодинамических. В частности для термодинамической энтропии рассматриваемых систем реакций $\Delta S_{R(\Sigma 1)} = \Delta S_{R(I)} + \Delta S_{R(II)}$ и $\Delta S_{R(\Sigma 2)} = \Delta S_{R(I)} + \Delta S_{R(II)} + \Delta S_{R(III)}$.

Инфомационно-теоретические индексы планируется использовать для изучения различных, в том числе многостадийных схем синтеза [55, 56]. Обычно предполагается, что при анализе химических реакций математические операции со структурными дескрипторами аналогичны операциям с термодинамическими параметрами (см. первые работы по этой теме [32, 57]). В наших предыдущих работах [43–45] было показано, что это не так, а в настоящей – установлены правила вычисления информационной энтропии химической реакции, включающей в себя параллельные стадии. Полученные соотношения будут использованы для создания алгоритмов [58], в которых изменение структурной сложности химических систем будет учитывать и информационно-теоретические дескрипторы, и кинетические параметры стадий химического процесса (что актуально для молекул, содержащих несколько одинаковых или близких по реакционной способности центров, например, фуллеренов и их производных [59]).

Таким образом, в работе выведена формула, устанавливающая связь между информационно-энтропийными параметрами в системах параллельных и независимых химических реакций. В системе независимых реакций каждая реакция вносит вклад в общее изменение информационной энтропии, который пропорционален доле атомов, приходящихся на участников этой реакции, в суммарном молекулярном ансамбле. В случае системы параллельных реакций эти доли одинаковы.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 22-13-20095 “Цифровая органическая химия – новая методология алгоритмизированной оценки хи-

мических реакций на основе информационно-энтропийных индексов").

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Станкевич И.М., Станкевич И.В., Зефиров Н.С.* // Успехи химии. 1988. Т. 57. С. 191–208.
2. *Sabirov D.S., Shepelevich I.S.* // *Entropy*. 2021. V. 23. P. 1240.
3. *Barigye S.J., Marrero-Ponce Y., Pérez-Giménez F., Bonchev D.* // Mol. Divers. 2014. V. 18. P. 673.
4. *Dehmer M., Mowshowitz A.* // Inf. Sci. 2011. V. 181. P. 57.
5. *Basak S., Harriss D., Magnuson V.* // J. Pharm. Sci. 1984. V. 73. P. 429.
6. *Basak S.C.* // Big Data Analytics in Chemoinformatics and Bioinformatics with Applications to Computer-Aided Drug Design, Cancer Biology, Emerging Pathogens and Computational Toxicology. Eds: Basak S.C., Vračko M. Elsevier, 2023. P. 3–35.
7. *Bonchev D.* // Bulgar. Chem. Commun. 1995. V. 28. P. 567.
8. *Sabirov D.S.* // Comput. Theor. Chem. 2016. V. 1097. P. 83.
9. *Sabirov D.S., Shepelevich I.S.* // Comput. Theor. Chem. 2015. V. 1073. P. 61.
10. *Sabirov D.S., Ori O., László I.* // Fullerene Nanotube Carbon Nanostruct. 2018. V. 26. P. 100.
11. *Augustine T., Roy S., Sahaya V.J. et al.* // Mol. Phys. 2023. V. 121. P. e2179858.
12. *Krivovichev S.* // Mineral. Mag. 2013. V. 77. P. 275.
13. *Aksenov S.M., Yamnova N.A., Borovikova E.Y. et al.* // J. Struct. Chem. 2020. V. 61. P. 1760.
14. *Bindi L., Nespolo M., Krivovichev S.V. et al.* // Rep. Prog. Phys. 2020. V. 83. P. 106501.
15. *Krivovichev S.V., Krivovichev V.G., Hazen R.M.* // Eur. J. Miner. 2018. V. 30. P. 231.
16. *Krivovichev S.V., Hawthorne F., Williams P.A.* // Struct. Chem. 2016. V. 28. P. 153.
17. *Krivovichev S.V., Krivovichev V.G., Hazen R.M. et al.* // Mineral. Mag. 2022. V. 86. P. 183.
18. *Banaru D.A., Hornfeck W., Aksenov S.M., Banaru A.M.* // CrystEngComm. 2023. https://doi.org/10.1039/D2CE01542K
19. *Banaru A., Aksenov S., Krivovichev S.* // Symmetry. 2021. V. 13. P. 1399.
20. *Jacob K., Clement J., Arockiaraj M. et al.* // J. Mol. Struct. 2023. V. 1277. P. 134786.
21. *Plášil J.* // Eur. J. Minerol. 2018. V. 30. P. 237.
22. *Hanif M.F., Mahmood H.* // Polycyclic Aromatic Compounds. 2022. https://doi.org/10.1080/10406638.2022.2149575
23. *Sabirov D.S., Ori O., Tukhbatullina A.A., Shepelevich I.S.* // *Symmetry*. 2021. V. 13. P. 1899.
24. *Augustine T., Santiago R.* // Symmetry. 2023. V. 15. P. 635.
25. *Rahul M.P., Clement J.* // Eur. Phys. J. Plus. 2022. V. 137. P. 1365.
26. *Rahul M., Clement J., Singh J.J. et al.* // J. Mol. Struct. 2022. V. 1260. P. 132797.
27. *Sabirov D., Tukhbatullina A., Shepelevich I.* // Liquids. 2021. V. 1. P. 25.
28. *Baby A., Julietraja K., Xavier D.A.* // Polycyclic Aromatic Compounds. 2023. https://doi.org/10.1080/10406638.2023.2179641
29. *Castellano G., Lara A., Torrens F.* // Phytochemistry. 2014. V. 97. P. 62.
30. *Castellano G., Torrens F.* // Phytochemistry. 2015. V. 116. P. 305.
31. *Sabirov D., Koledina K.* // EPJ Web. 2020. V. 244. P. 01016.
32. *Karreman G.* // Bull. Math. Biol. 1955. V. 17. P. 279.
33. *Кобозев Н.И.* // Журн. физ. химии. 1966. Т. 40. С. 281.
34. *Кобозев Н.И., Страхов Б.В., Рубашов А.М.* // Там же. 1971. Т. 45. С. 86.
35. *Кобозев Н.И., Страхов Б.В., Рубашов А.М.* // Там же. 1971. Т. 45. С. 375.
36. *Sabirov D.S., Osawa E.* // J. Chem. Inf. Model. 2015. V. 55. P. 1576.
37. *Sabirov D.S., Sokolov V.I., Terentyev O.A.* // RSC Adv. 2016. V. 6. P. 72230.
38. *Sabirov D.S., Tukhbatullina A.A., Shepelevich I.S.* // Symmetry. 2022. V. 14. P. 1800.
39. *Feng B., Zhuang X.* // Acta Chimica Sinica. 2020. V. 78. P. 833.
40. *Champion Y., Thurieau N.* // Sci. Rep. 2020. V. 10. P. 10801.
41. *Бальмаков М.Д.* // Успехи физ. наук. 1999. Т. 169. С. 1273.
42. *Кадомцев Б.Б.* // Там же. 1994. Т. 164. С. 449.
43. *Sabirov D.S.* // Comput. Theor. Chem. 2018. V. *1123*. P. 169.
44. *Sabirov D.S.* // Ibid. 2020. V. 1187. P. 112933.
45. *Sabirov D.S., Tukhbatullina A.A., Shepelevich I.S.* // J. Mol. Graph. Model. 2022. V. 110. P. 108052.
46. *Бенсон С.* Термохимическая кинетика. М.: Мир, 1971. 308 с.
47. *Sabirov D.Sh.* // Understanding Information Entropy. Ed.: *Kumar V.* Nova Publishers, 2023.
48. *Nielsen M.A., Chuang I.L.* Quantum Computation and Quantum Information. Cambridge University Press, 2001. P. 822.
49. *Sharma A., Thakur P., Kumar G., Kumar A.* // Modern Phys. Lett. A. 2021. V. 36. P. 2150065.
50. *Matsubara S.* // Chem. Lett. 2021. V. 50. P. 475.
51. *Grzybowski A.B., Badowski T., Molga K., Szymkuć S.* // WIREs Comput. Mol. Sci. 2023. V. 13. P. e1630.
52. *Тухбатуллина А.А., Шепелевич И.С., Сабиров Д.Ш.* // Вестн. Башкирск. ун-та. 2022. Т. 27. № 2. С. 349.
53. *Ugi I., Gillespie P.* // Angew. Chem. 1971. V. 10. P. 914.
54. *Hunter K.C., East A.L.L.* // J. Phys. Chem. A. 2002. V. 106. P. 1346.
55. *Bertz S.H.* // New J. Chem. 2003. V. 27. P. 860.
56. *Matsubara S.* // Chem. Lett. 2021. V. 50. P. 475.
57. *Жданов Ю.А.* Энтропия информации в органической химии. Ростов н/Д: изд-во Ростовского ун-та, 1979. 56 с.
58. *Коледина К.Ф.* // Математическое моделирование. 2022. Т. 34. С. 97.
59. *Sabirov D.S., Shepelevich I.S., Tumanskii B.L.* // Comput. Theor. Chem. 2018. V. 1138. P. 84.