

Abstract

Structural descriptors in evaluation of selected physicochemical properties of homologous series of saturated fatty acids

*A. PYKA**, *K. BOBER*

SILESIAN ACADEMY OF MEDICINE - FACULTY OF PHARMACY - DEPARTMENT OF ANALYTICAL CHEMISTRY – SOSNOWIEC - POLAND

The purpose of the research was to settle the relationships between selected physicochemical properties and structural descriptors of homologous series of saturated fatty acids (QSPR). The selected topological indexes based on distance matrix, adjacency matrix and information theory as well as electrotopological states were used during research. The physicochemical properties predicted were as follows: heat of combustion, partition coefficient, resolidification point, refractivity, heat of crystallization, melting point and boiling point. The correlation equations obtained serve for calculating numerical value of individual physicochemical quantities as wells as for prediction of numerical values of physicochemical quantities for various acids, which were intentionally omitted in correlation equations. The usefulness of applied structural descriptors for calculating and prediction individual physicochemical properties of homologous series of fatty acids investigated was compared and estimated.

Key words: Topological index; electrotopological state; saturated fatty acid, QSPR.

DESCRITTORI STRUTTURALI NELLA VALUTAZIONE DI PROPRIETA' CHIMICO-FISICHE SELEZIONATE DI SERIE OMOLOGHE DI ACIDI GRASSI SATURI

Lo scopo della ricerca era quello di fissare le relazioni fra selezionate proprietà chimico-fisiche e descrittori strutturali di serie omologhe di acidi grassi. Durante la ricerca sono stati usati gli indici topologicamente selezionati basati sulle distanze di matrice, di adiacenza di matrice e su informazioni dalla teoria così come gli stati elettrotopologici.

Le proprietà chimico-fisiche predette erano le seguenti: calore di combustione, coefficiente di partizione, punto di risolidificazione, rifrazione, calore di cristallizzazione, punto di fusione e di ebollizione. Le equazioni di correlazione ottenute sono utili sia per calcolare i valori numerici delle singole quantità chimico-fisiche sia per la predizione delle singole quantità chimico-fisiche per i vari acidi, che sono state intenzionalmente omessi nelle equazioni di correlazione. E' stata comparata e stimata l'utilità di descrittori strutturali applicati per calcolare e predire le proprietà chimico-fisiche individuali di serie omologhe degli acidi grassi investigati.

Parole chiave: Indice topologico; stato elettrotopologico; acidi grassi saturi, QSPR.