

Vzgojno izobraževalni zavod Antona Martina Slomška,
Škofijska gimnazija Antona Martina Slomška,
Vrbanska cesta 30, 2000 Maribor

MATEMATIČNO MODELIRANJE ALKENOV ZA DOLOČEVANJE NJIHOVIH FIZIKALNIH LASTNOSTI

Kemija in kemijska tehnologija

Raziskovalna naloga

Avtor: Neja Flogie, Vanja Urh

Mentor: Andreja Navršnik Kačič, Petra Žigert Pleteršek

Maribor, marec 2021

KAZALO

| | |
|--|-----------|
| 1. UVOD | 10 |
| 1.1 HIPOTEZE | 11 |
| 2. TEORETIČNI DEL | 11 |
| 2.1 PREDSTAVITEV MOLEKUL | 11 |
| 2.1.1 Zapisi formul molekul organskih spojin | 11 |
| 2.1.2 Kemoinformatika | 12 |
| 2.1.3 Grafi molekul | 13 |
| 2.1.4 Linearni zapisi molekul | 15 |
| 2.1.4.1 Zapis SMILES | 15 |
| 2.1.4.2 Zapis MOL | 17 |
| 2.2 WIENERJEV INDEKS | 18 |
| 2.2.1 Zgodovina Wienerjevega indeksa..... | 18 |
| 2.2.2 Definicija..... | 19 |
| 2.2.2.1 Teorija grafov | 19 |
| 2.2.2.1.1 Matrika sosednosti | 20 |
| 2.2.2.2 Računanje Wienerjevega indeksa s pomočjo grafa molekule | 21 |
| 2.2.2.3 Determinacijski koeficient oziroma R^2 | 22 |
| 3. PRAKTIČNI DEL | 23 |
| 3.1 Računalniški program za izračun Wienerjevih indeksov | 23 |
| 3.1.1 Sestava programa | 25 |
| 4. REZULTATI IN UGOTOVITVE | 33 |
| 4.1 REZULTATI REGRESIJSKE PREMICE | 33 |
| 4.2 REZULTATI KRIVULJE EKSPONENTNE REGRESIJE | 35 |
| 4.3 LOGARITEMSKA FORMULA IN NADALJEVANJE PROGRAMA | 37 |
| 5. RAZPRAVA | 40 |
| 6. ZAKLJUČEK | 42 |
| 7. DRUŽBENA ODGOVORNOST | 43 |
| 8. REFERENCE | 44 |

KAZALO GRAFOV

| | |
|--|----|
| Graf 1: Graf molekule propena | 20 |
| Graf 2: Primer diagrama vrelišč z vrisano regresijsko premico | 31 |
| Graf 3: Regresijska premica pri vrednosti dvojne vezi 0,25 | 32 |
| Graf 4: Regresijska premica pri vrednosti dvojne vezi 0,5 | 32 |
| Graf 5: Regresijska premica pri vrednosti dvojne vezi 0,75 | 32 |
| Graf 6: Regresijska premica pri vrednosti dvojne vezi 1 | 32 |
| Graf 7: Regresijska premica pri vrednosti dvojne vezi 1,25 | 32 |
| Graf 8: Regresijska premica pri vrednosti dvojne vezi 1,5 | 32 |
| Graf 9: Regresijska premica pri vrednosti dvojne vezi 1,75 | 33 |
| Graf 10: Regresijska premica pri vrednosti dvojne vezi 2 | 33 |
| Graf 11: Regresijska premica pri vrednosti dvojne vezi 2,25 | 33 |
| Graf 12: Regresijska premica pri vrednosti dvojne vezi 2,5 | 33 |
| Graf 13: Krivulja eksponentne regresije pri vrednosti dvojne vezi 0,25 | 34 |
| Graf 14: Krivulja eksponentne regresije pri vrednosti dvojne vezi 0,5 | 34 |
| Graf 15: Krivulja eksponentne regresije pri vrednosti dvojne vezi 0,75 | 34 |
| Graf 16: Krivulja eksponentne regresije pri vrednosti dvojne vezi 1 | 34 |

| | |
|--|----|
| Graf 17: Krivulja eksponentne regresije pri vrednosti dvojne vezi 1,25 | 35 |
| Graf 18: Krivulja eksponentne regresije pri vrednosti dvojne vezi 1,5 | 35 |
| Graf 19: Krivulja eksponentne regresije pri vrednosti dvojne vezi 1,75 | 35 |
| Graf 20: Krivulja eksponentne regresije pri vrednosti dvojne vezi 2 | 35 |
| Graf 21: Krivulja eksponentne regresije pri vrednosti dvojne vezi 2,25 | 35 |
| Graf 22: Krivulja eksponentne regresije pri vrednosti dvojne vezi 2,5 | 35 |
| Graf 23: Diagram logaritemske funkcije | 37 |

KAZALO TABEL

| | |
|---|----|
| Tabela 1: Tabela stopnje povezanosti za posamezne vrednosti R^2 | 22 |
| Tabela 2: Tabela rezultatov za linearno funkcijo | 33 |
| Tabela 3: Tabela rezultatov za eksponentno funkcijo | 36 |

KAZALO SLIK

| | |
|---|----|
| Slika 1: Molekulska formula glukoze | 11 |
| Slika 2: Empirična formula glukoze | 11 |
| Slika 3: Stereokemijska formula glukoze | 11 |
| Slika 4: Primer strukturne formule | 12 |

| | |
|--|----|
| Slika 5: Primer racionalne formule | 12 |
| 12 Slika 6: Primer grafa molekule | 12 |
| Slika 7: Primer izomorfni grafov..... | 13 |
| Slika 8: Primer strukture datoteke MOL (www.cheminfo.org) | 16 |
| Slika 9: Ponazoritev grafa Königsberških mostov z grafom | 18 |
| Slika 10: Graf G | 19 |
| Slika 11: Pretvorba zapisa formule v graf molekule | 20 |
| Slika 12: Primer izračunanega Wienerjevega indeksa | 23 |
| Slika 13: Izpis programske kode programa | 24 |
| Slika 14: Sestava programske kode | 25 |
| Slika 15: Zaslonski posnetek izseka tabele z izračunanimi Wienerjevimi indeksi za posamezne vrednost - stran 1 | 26 |
| Slika 16: Zaslonski posnetek izseka tabele z izračunanimi Wienerjevimi indeksi za posamezne vrednost - stran 2 | 26 |
| Slika 17: Zaslonski posnetek izseka tabele z izračunanimi Wienerjevimi indeksi za posamezne vrednost - stran 3 | 27 |
| Slika 18: Zaslonski posnetek izseka tabele z izračunanimi Wienerjevimi indeksi za posamezne vrednost - stran 4 | 27 |
| Slika 19: Zaslonski posnetek izseka tabele z izračunanimi Wienerjevimi indeksi za posamezne vrednost - stran 5 | 28 |
| Slika 20: Zaslonski posnetek izseka tabele z izračunanimi Wienerjevimi indeksi za posamezne | |

| | |
|---|----|
| vrednost - stran 6 | 28 |
| Slika 21: Zaslonski posnetek izseka tabele z izračunanimi Wienerjevimi indeksi za posamezne vrednost - stran 7 | 29 |
| Slika 22: Zaslonski posnetek izseka tabele z izračunanimi Wienerjevimi indeksi za posamezne vrednost - stran 8 | 29 |
| Slika 23: Zaslonski posnetek izseka tabele z izračunanimi Wienerjevimi indeksi za posamezne vrednost - stran 9 | 30 |
| Slika 24: Zaslonski posnetek izseka tabele z izračunanimi Wienerjevimi indeksi za posamezne vrednost - stran 10 | 30 |
| Slika 25: Zaslonski posnetek izseka tabele z izračunanimi Wienerjevimi indeksi za posamezne vrednost - stran 11 | 31 |
| Slika 26: Dodatek k sestavi programa | 37 |
| Slika 27: Dokončen izpis programa | 38 |

POVZETEK

Wienerjev indeks je poznan indeks za izračunavanje fizikalnih lastnosti alkanov in skozi raziskovalno nalogo smo podrobneje raziskali računanje le-tega pri alkenih. S pomočjo računalniškega programa smo ugotovili, katero vrednost je pri računanju Wienerjevega indeksa alkenov najbolj smiselno vstaviti v matriko razdalj kot vrednost dvojne vezi, da bodo izračunane temperature vrelišč alkenov čim bližje dejanskim temperaturam v naravi. Pri vstavljanju regresijske premice v diagram rezultatov smo ugotovili, da najbližje temperature vrelišč dobimo, če za vrednost dvojne vezi vstavimo število 1,25, saj je pri tem vrednost determinacijskega koeficienta najvišja ($R^2 = 0,9092$). Pri vstavljanju krivulje eksponentne regresije v diagram dobimo na splošno še višje vrednosti determinacijskega koeficienta, najvišjo pa pri vrednosti dvojne vezi 1,5, kjer je koeficient enak 0,9648. Tako smo našli boljši način za računanje Wienerjevega indeksa alkenov in pa logaritemsko formulo, s katero lahko napovemo temperaturo vrelišča za alkene z eno dvojno vezjo.

KLJUČNE BESEDE: Wienerjev indeks, alkeni, temperatura vrelišča, determinacijski koeficient, regresijska črta, krivulja eksponentne regresije

ABSTRACT

The Wiener index is a well-known index for calculating the physical properties of alkanes. In the research paper the calculation for alkenes is explored in more detail. By using a computer program, we determined which value inserted into the distance matrix as the value of the double bond when calculating the Wiener index of alkenes is more logical in order for calculated boiling points of alkenes to be as close as possible to actual temperatures in nature. When inserting the regression line into the results diagram, we have found out the closest boiling temperatures are obtained by inserting the number 1.25 for the value of the double bond, since the value of the determination coefficient is the highest ($R^2 = 0.9092$). When inserting the exponential regression curve into the diagram, we have generally gained even higher values of the coefficient of determination, and the highest at the value of the double bond 1.5, where the coefficient is equal to 0.9648. Thus, a better way to calculate the Wiener index of alkenes was found, as well as a logarithmic formula with which we can predict the boiling point for alkenes with a single double circuit.

KEY WORDS: Wiener index, alkenes, boiling point, determination coefficient, regression line, exponential regression curve

ZAHVALA

Zahvaljujema se najinima mentoricama, gospe Andreji Navršnik Kačič in gospe Petri Žigert Pleteršek, ki sta z veseljem in vztrajno pregledovali najine osnutke ter naju vedno usmerjali na pravo pot.

Zahvaljujema se najinima družinama in prijateljem, ki so naju spodbujali in razumeli vsak večer, ki sva ga namesto z njimi preživeli na »Zoomu« ob pisanju te raziskovalne naloge.

Zahvaljujema se najini razredničarki, gospe Bernardki Radej, ki naju je zvesto podpirala in nama stala ob strani, ter nekdanjemu profesorju, gospodu Mihaelu Gojkošku, ki naju je navdušil nad raziskovanjem.

1. UVOD

Fizikalne lastnosti snovi lahko v kemiji predvidimo s pomočjo topoloških indeksov. Eden izmed bolj znanih je Wienerjev indeks, s pomočjo katerega lahko predvidimo temperaturo vrelišč ogljikovodikov. Tega je prvi predstavil Harold Wiener leta 1947. Vpeljan je bil na podlagi alkanov, še danes pa isto formulo uporabljamo tudi pri alkenih in alkinih.

Mi smo se za začetek osredotočili le na alkene. Predvidevamo lahko, da podatki temperatur vrelišč alkenov, pridobljeni s pomočjo Wienerjevega indeksa, ne bodo tako natančni, saj imajo ti ogljikovodiki poleg enojne tudi dvojno vez, ki je v samem indeksu sicer ne upoštevamo, leta pa zagotovo vpliva na njihove fizikalne lastnosti.

Tako smo ugotovili, da takšni podatki zagotovo ne morejo biti točni, saj če Wienerjev indeks (in posledično temperaturo vrelišča) določenega alkena izračunamo po formuli za ogljikovodik s samimi enojnimi vezmi, prej omenjeni alken tako spremenimo v alkan. Primer: pent-2-en se tako spremeni v pentan, njuni temperaturi vrelišča pa se zaradi drugačne zgradbe molekule med seboj razlikujeta.

Na tem področju do sedaj ni bilo veliko raziskav oziroma le-te niso široko dostopne. Do podatkov smo v večini dostopali preko interneta, saj se nam je zdelo, da so tam najnovejši podatki s tega področja, predvsem kar se tiče temperatur vrelišč, vendar so tudi med različnimi spletnimi stranmi manjša odstopanja. Temperatura vrelišča je namreč lastnost, ki jo je zelo težko določiti popolnoma natančno, saj je v vsakem eksperimentu odstopanje za nekaj stopinj Celzija.

Naš glavni cilj raziskovalne naloge je bil podrobneje raziskati Wienerjev indeks na področju alkenov in poiskati boljšo formulo za računanje njihovih temperatur vrelišč.

Naše glavne metode dela so vključevale raziskovanje literature ter računanje in eksperimentiranje z različnimi števili, formulami in podatki. Zbrali smo veliko množico podatkov, ki pa smo jih kasneje tudi podrobno statistično analizirali, da smo jih lahko uporabili v raziskovalnem delu.

1.1 HIPOTEZE

HIPOTEZA 1: Podatki o lastnostih molekul so na spletu hitro in enostavno dostopni; molekule so preprosto predstavljive.

HIPOTEZA 2: Če je med dvema ogljikovima atomoma (namesto enojne) dvojna vez, sta si v naravi fizično bližje skupaj, torej mora biti razdalja v matriki sosednosti manj kot 1.

HIPOTEZA 3: Zaradi spremenjenega modeliranja alkenov bomo dobili boljše napovedane vrednosti vrelišča iz Wienerjevega indeksa.

2. TEORETIČNI DEL

2.1 PREDSTAVITEV MOLEKUL

2.1.1 Zapisi formul molekul organskih spojin

Molekule so osnovni gradniki snovi, ki nastanejo s kovalentno vezjo pri povezovanju atomov nekovin. Lahko so različnih velikosti – v naravi lahko najdemo tako zelo majhne, kot sta molekula vode in amonijak, kot tudi zelo velike, kot so na primer polisaharidi ali molekule deoksiribonukleinske kisline (DNK). (Hribar-Lee & Podlipnik, 2019)

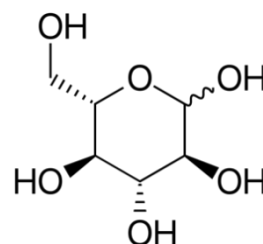
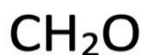
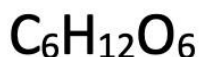
Poznamo različne vrste formul za predstavitev organskih spojin. Najpreprostejši sta empirična formula in molekulska formula. Z molekulsko formulo predstavimo število posameznih atomov v molekuli, vendar ta ne upošteva izomerije in razporeditve atomov znotraj molekule (slika 1). Empirična prikaže različne atome v molekuli in razmerje med njimi (primer – glej slika 2). Običajno poleg empirične formule zapišemo tudi relativno molekulsko maso spojine, saj lahko tako potem določimo molekulsko formulo. (Smrdu, 2010)

Veliko bolj nazorna je strukturna formula, iz katere lahko takoj in nedvoumno razberemo, kako so atomi v molekuli povezani, zato se kemiki mnogokrat obračajo k njej. Poenostavitev strukturne formule je racionalna formula, ki ne prikazuje vezi med vodikovimi in ostalimi atomi, pri alkanih pa v praksi spuščamo tudi vezi med ogljikovimi atomi. Pri daljših verigah ali cikličnih oblikah se kemiki zatekajo k skeletni formuli, ki ponazarja ogrodje oz. skelet molekule. Le-ta je prikazana s pomočjo črt oziroma vezi. Ogljikovi atomi so na koncu verige in

na vseh sklepih, vendar se tam posebej ne pišejo. Vedno pa moramo napisati atome kisika, dušika, žvepla itd., in tudi vodikove atome, ki so neposredno vezani na njih, na primer – -OH ali -NH₂. Enojne vezi so označene z eno, dvojne z dvema in trojne vezi s tremi črtami. (Smrdu, 2010)

Največ pa nam pove stereokemijska formula, vendar je za pisanje zelo zamudna in se je ne poslužujemo velikokrat. Stereokemijska formula prikaže vse atome in njihovo prostorsko razporeditev v molekuli. Najbolj je podobna strukturalni formuli, le da so vezi med posameznimi atomi drugače označene. Neodebeljene vezi ležijo v ravnini zaslona, lista, odebeljena črta (klin) prikazuje vez, ki je usmerjena iz ravnine zaslona oziroma lista (v smeri proti opazovalcu), črčkasta črta pa prikazuje vez, ki je usmerjena iz ravnine zaslona oziroma lista v nasprotno smer (v smeri od opazovalca). (Smrdu, 2010)

Primeri različnih zapisov formul:



Slika 1: Molekulska formula glukoze

Slika 2: Empirična formula glukoze

Slika 3: Stereokemijska formula glukoze

2.1.2 Kemoinformatika

Kemoinformatika je interdisciplinarna veda, ki združuje kemijo ter osnove programiranja, kot veje informatike, zraven pa se opira še na fiziko, biologijo, matematiko in biokemijo. Primarna uporaba kemoinformatike je shranjevanje, indeksiranje in iskanje informacij v zvezi s kemičnimi spojinami, saj igra ključno vlogo pri ohranjanju in dostopanju do ogromnih količin kemijskih podatkov s pomočjo ustrezne podatkovne baze. (Guha & Theisen, 2020)

Z raznimi algoritmi lahko napovemo nekatere kemijske lastnosti spojin še pred laboratorijskim testiranjem. Kemoinformatični pristopi seveda ne morejo nadomestiti laboratorijskih poskusov, vendar so ne glede na to dandanes zelo koristni, saj omogočajo preiskavo širokega kemijskega področja, zmanjšujejo stroške raziskav in pomagajo pri snovanju novih hipotez. Tri glavne uporabe kemoinformatike zajemajo postopek zbiranja in razvrščanja podatkov s pomočjo eksperimentov oziroma iz teorije, shranjevanje in pridobivanje informacij in pa dejansko uporabo teh informacij v problemih. (Begam &

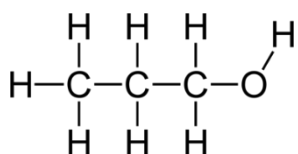
Satheesh Kumar, 2012) Kemoinformatika ni uporabna le na področju kemije, ampak ima veliko širši obseg uporabe. Večinoma se je v veliki meri poslužujejo na področju farmacije pri odkrivanju novih zdravil, podobne metode pa se lahko uporabljajo tudi v drugih sorodnih kemijskih panogah ter na drugih področjih, kjer sodelujejo in proučujejo kemijske procese (na primer biologija ali biokemija). (Wishart, 2007)

Čeprav si na področju kemije ljudje že dolgo pomagamo z računalništvom, se je sam izraz kemoinformatika pojavil šele pred kratkim in zato ni presenetljivo, da so glede tega znotraj stroke skozi leta nastala manjša trenja glede te novonastale veje znanosti – celo glede samega poimenovanja te poddiscipline. (Leach & Gillet, 2007)

2.1.3 Grafi molekul

Kemijske strukture so v računalniških podatkovnih bazah lahko shranjene prav v obliki grafov molekul. To je veliko bolj uporabna oblika, kot na primer slikovna datoteka neke molekule, saj slednja sicer omogoča reprodukcijo te strukture, a ne iskanja na podlagi njene kemijske strukture. (Hribar-Lee & Podlipnik, 2019)

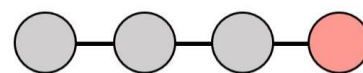
Molekulo lahko karakteriziramo takrat, ko poznamo njeno topologijo, torej način povezovanja med posameznimi atomi. Pri tem si pomagamo tako, da molekulsko formulo pretvorimo v strukturno formulo, racionalno formulo ali pa graf molekule. (Hribar-Lee & Podlipnik, 2019) Primer različnih zapisov molekule propan-1-ola:



Slika 4: Primer strukturne formule



Slika 5: Primer racionalne formule

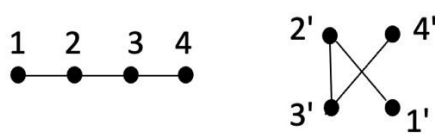


Slika 6: Primer grafa molekule

Strukturna in racionalna formula sta omenjeni že v prvem podpoglavju prvega poglavja 2.1.1 *Zapisi formul molekul organskih spojin*. Graf molekul prikazuje atome kot točke. Povezave med njimi predstavljajo vezi. V takih primerih vodikovih atomov ne pišemo, saj bi to

podaljšalo graf in otežilo branje, tako pa je računanje povezano z grafom veliko hitrejše. Točke, ki predstavljajo atome, rišemo z različnimi barvami, saj na ta način prikažemo, kateremu elementu pripada posamezni atom oziroma točka (v primeru na sliki 6 sive točke predstavljajo ogljikove atome, rdeča točka pa predstavlja kisik). (Hribar-Lee & Podlipnik, 2019)

Grafi molekul so lahko grajeni na več različnih načinov, zato potrebujemo posebne metode za ugotavljanje, če sta dva posamezna grafa enaka; v teoriji je ta problem znan kot izomorfizem grafov. Prav to je vzrok, da je računalništvo razvilo učinkovite algoritme, s pomočjo katerih lahko ugotovimo, ali sta dva molekularna grafa izomorfna. Trivialna zahteva je, da imata grafa enako število vozlišč (točk) in povezav; nato pa se vzpostavi preslikava iz enega grafa na drugega, tako da ima vsako vozlišče in vsaka povezava enega grafa ekvivalenten dvojniki v drugem grafu. (Leach & Gillet, 2007)



Slika 7: Primer izomorfnih grafov

Kako so atomi med seboj povezani, lahko prikažemo na dva načina. Prvi je matrika sosednosti, ki je podrobneje opisana v poglavju 2.2.2.1.1 *Matrika sosednosti*, drugi način pa je prikazovanje s pomočjo povezovalne tabele. Najpreprostejša različica te tabele je bolj racionalen zapis grafa, saj zapišemo le položaje od nič različnih matričnih elementov, bolj zapleten pa lahko vsebuje med drugim tudi hibridizacijo posameznega atoma ali njegove xyz koordinate.

Preprosto tabelo zgradimo na naslednji način: najprej po vrsti oštevilčimo vse atome, ki gradijo molekulo in zapišemo, kateri element predstavljajo. V drugem delu tabele opišemo vsako vez – po vrsti napišemo najprej katera dva atoma povezuje, na koncu pa napišemo število 1, če je enojna, število 2, če je dvojna ali pa število 3, če je med tema atomoma trojna vez. (Hribar-Lee & Podlipnik, 2019)

Primer povezovalne tabele za propan-1-ol:

Atomi

1 C

2 C

3 C

4 O

Vezi

1 1 2 1

2 2 3 1

3 3 4 1

2.1.4 Linearni zapisi molekul

Linearni zapisi molekul predstavljajo kemijske strukture kot raven niz znakov. So zelo pogost zapis molekul v kemoinformatiki, saj računalniki veliko lažje preberejo in obdelujejo takšno vrsto podatkov – prav zato se uporabljajo za shranjevanje in prenašanje velikega števila molekul.

Najbolj znani in trenutno uporabljeni linearni zapisi so SMILES (“Simplified Molecular-Input Line-Entry System”), InChI (“IUPAC Chemical Identifier) in MOL file (zapis MOL). Podrobneje bomo opisali MOL in SMILES, saj smo se s tema zapisoma v raziskovalni nalogi največkrat srečevali. (LibreTexts, 2020)

2.1.4.1 Zapis SMILES

Zapis SMILES sta osnovala brata Arthur in David Weininger v poznih 80. letih 20. stoletja. SMILES je kratica za *Simplified Molecular Input Line Entry System* in se uporablja za pretvarjanje kemijske tridimenzionalne strukture v vrsto simbolov. Gre za enoznačen zapis molekulske strukture, ki uporablja nize ASCII znakov, zato ga računalnik lahko učinkovito obdeluje. Ta pravila so kasneje razširili, nekoliko dodelali in standardizirali, sedaj pa jih najdemo v javno dostopnem standardu imenovanem “Open SMILES”. Med kemiki in kemoinformatiki je priljubljen, saj je veliko lažji za uporabo kot njegovi predhodniki (na

primer Wiswesser Line Notation – WLN), saj lahko le z nekaj pravili zapišemo in razumemo večino zapisov SMILES. (Gastgeiger, 2003)

Zapis je osnovan tako, da posamezne atome, ki sestavljajo molekulo, zapišemo z njihovim znakom na periodnem sistemu v oglatem oklepaju (primer: [Au] za zlato). Elemente, ki sestavljajo organske spojine: ogljik, dušik, kisik, fosfor, žveplo in vse halogene elemente praviloma pišemo brez oglatih oklepajev. Le-te uporabimo, če želimo navesti neko dodatno lastnost (primer: [N+] - pozitivno nabit dušikov delec). Med te elemente zapišemo znake, ki predstavljajo vrsto vezi med elementoma; - predstavlja enojno vez, = dvojno vez in # trojno vez (primer: etan C-C, eten C=C, etin C#C). Znak : predstavlja vezi v aromatskih spojinah, v zapisu SMILES znak za enojno običajno izpuščamo. Oznaka . pomeni, da med atomoma ni kovalentne vezi. Če želimo zapisati razvejano molekulo, posamezne veje zapišemo v oklepaj, na primer: 2-etilpentan CCC(CC)CC. Pri zapisovanju aromatskih molekulskih sistemov uporabljamo namesto velikih tiskanih črk male tiskane črke. Pri cikličnih strukturah atome, ki obroč zapirajo, označimo z istima številka (primer: benzen c1ccccc1). (Hribar-Lee & Podlipnik, 2019)

Primeri:

COC dimetil eter (CH₃OCH₃)

O=CO metanojska kislina (HCOOH)

[H][H] molekularni vodik (H₂)

CCO etanol (CH₃CH₂OH)

C#N vodikov cianid (HCN)

C(OC(=O)C)1=C(C(=O)O)C=CC=C1 aspirin

2.1.4.2 Zapis MOL

Zapis MOL je pogosto uporabljen in zelo podroben zapis molekulske strukture. Njegove prednosti so, da lahko prikaže vse atome elementov, ki sestavljajo molekulo, vrste vezi med posameznimi atomi, 2D in 3D prostorske koordinate atomov, posebnosti posameznih atomov in vezi (na primer R in S konfiguracija stereocentra) ter vse posebnosti molekule kot celote (na primer njen skupen naboj). (Belford, 2019)

Predstavljen je v obliki tabele, ki je zelo podrobna, zato moramo dobro razumeti njeno strukturo, da lahko iz nje prepoznamo lastnosti določene molekule.

MOL zapis molekule benzojske kisline izgleda tako¹:

| Molfile | | | | | | | | | | | | | | |
|---------|---|--------|--------|---|---|---|---|---|---|---|---|---|------|-------|
| 1 | O=C(O)c1ccccc1 | | | | | | | | | | | | | |
| 2 | JME 2017-11-16 Tue Dec 29 14:24:03 GMT+100 2020 | | | | | | | | | | | | | |
| 3 | | | | | | | | | | | | | | |
| 4 | 9 | 9 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0999 | V2000 |
| 5 | 2.4249 | 0.7000 | 0.0000 | C | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 6 | 2.4249 | 2.1000 | 0.0000 | C | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 7 | 1.2124 | 2.8000 | 0.0000 | C | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 8 | 0.0000 | 2.1000 | 0.0000 | C | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 9 | 0.0000 | 0.7000 | 0.0000 | C | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 10 | 1.2124 | 0.0000 | 0.0000 | C | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 11 | 3.6373 | 2.8000 | 0.0000 | C | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 12 | 4.8497 | 2.1000 | 0.0000 | O | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 13 | 3.6373 | 4.2000 | 0.0000 | O | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 14 | 1 | 2 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | | | | | | | |
| 15 | 2 | 3 | 2 | 0 | 0 | 0 | 0 | | | | | | | |
| 16 | 3 | 4 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | | | | | | | |
| 17 | 4 | 5 | 2 | 0 | 0 | 0 | 0 | | | | | | | |
| 18 | 5 | 6 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | | | | | | | |
| 19 | 6 | 1 | 2 | 0 | 0 | 0 | 0 | | | | | | | |
| 20 | 2 | 7 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | | | | | | | |
| 21 | 7 | 8 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | | | | | | | |
| 22 | 7 | 9 | 2 | 0 | 0 | 0 | 0 | | | | | | | |
| 23 | M END | | | | | | | | | | | | | |
| 24 | | | | | | | | | | | | | | |

Slika 8: Primer strukture datoteke MOL (www.cheminfo.org)

V prvi vrstici spletna stran, ki smo jo uporabili, izpiše še SMILES kodo molekule, ki smo jo pred tem narisali, da točno vemo, katero molekulo opisuje. V drugi vrstici je časovni žig, ki pove, kdaj natančno smo iskali te podatke, od četrte vrstice izpisa naprej pa je prikazana datoteka MOL. Najprej je zapisano, koliko je vseh atomov skupno v molekuli (označeno s svetlo oranžno barvo) in koliko vezi je skupno med njimi (temno modro). Nato sledijo podatki, ki za sam MOL niso tako pomembni (svetlo modro), na tretjem mestu v tem delu

¹ Računalniški zapis je črno-bel, barve so dodane le za lažjo predstavo.

datoteke MOL pa se nahaja tudi podatek o kiralnosti molekule - število ena pomeni, da je molekula kiralna, število nič pa, da ta molekula ni optično aktivna, je akiralna (označeno rdeče). Na koncu te četrte vrstice sledi le še podrobnejši podatek o formatu računalniške datoteke (bordo rdeče). (Belford, 2019)

Sledijo prostorske koordinate X, Y in Z vsakega atoma (vijolično), poleg njih pa je označeno, atom katerega elementa se tukaj nahaja (temno oranžno). Desno od teh podatkov lahko najdemo tudi podatke o izotopih, nabojih, vezljivosti in drugih posebnostih, ki pa jih benzojska kislina, kot vidimo na sliki 7, nima (svetlo zeleno). (Belford, 2019)

Od 14. do 22. vrstice sledijo še podatki o vezeh znotraj molekule. Prva dva stolpca (svetlo siva) povesta, med katerima atomoma po vrsti je vez, nato sledi njen tip - število ena na tem mestu predstavlja enojno, število dve dvojno in število tri trojno vez (koralna barva). Naslednji stolpec poda informacijo o tem, če je vez stereokemijska (roza). (Belford, 2019)

2.2 WIENERJEV INDEKS

2.2.1 Zgodovina Wienerjevega indeksa

Wienerjev indeks ali Wienerjevo število (W) je prvi predstavil Harold Wiener v svojih zapisih januarja leta 1947, ki ga je takrat poimenoval kot "*path number*" oziroma število poti, in predstavlja najstarejši topološki indeks povezan z razvejanostjo molekul. (Wiener, 1947)

Harry Wiener je bil ameriški kemik, zaposlen na Brooklynski univerzi, ki je veliko prispeval k proučevanju topoloških indeksov in vzpostavil korelacijo med Wienerjevim indeksom in vrelišči parafinov ter s tem povezal teorijo grup, teorijo grafa in kemijo kot vedo samo. (Ma, Shi, & Yue, 2014)

V svojem prvem članku izpostavi, da lahko temperaturo vrelišča T_v približno določimo po formuli:

$$T_v = aW + bp + c,$$

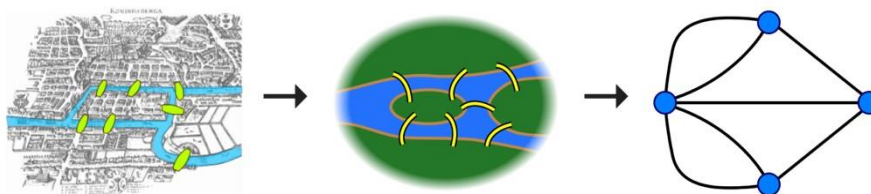
pri čemer W predstavlja Wienerjev indeks, p predstavlja polarnostno število² (*angl. polarity number*), a , b in c pa predstavljajo parametre za dano skupino izomerov. Od takrat dalje je ta indeks postal eden izmed največkrat uporabljenih topoloških indeksov v kemiji, saj so molekule po navadi modelirane kot neusmerjeni grafi, zlasti drevesa. Na podlagi uspeha Wienerjevega indeksa so kasneje razvili številne druge topološke indekse kemijskih grafov, ki temeljijo na povezanosti in na razdaljah v grafu. (Ma, Shi, & Yue, 2014)

2.2.2 Definicija

2.2.2.1 Teorija grafov

Teorija grafov je veja matematike, ki preučuje lastnosti grafov. Je razmeroma široko področje, ki se v zadnjih desetletjih naglo razvija, uporabno pa ni samo na področjih kemije, ampak vedno pogosteje tudi v drugih naravoslovnih in družboslovnih znanostih.

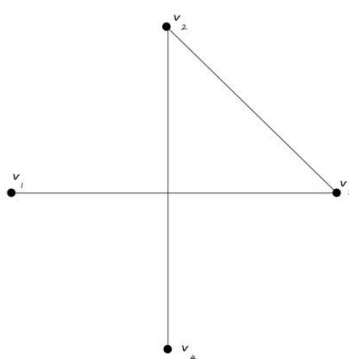
Za njen začetek se pogosto šteje objava Eulerjevega članka o sedmih Königsberških mostovih. Gre za uganko, ki so si jo postavljali prebivalci Königsberga in se spraševali, ali se da preko sedmih mostov, ki povezujejo štiri dele mesta, sprehoditi tako, da bi pri tem prehodili vse mostove, a vsakega le enkrat. Euler se je tega lotil tako, da je skico mesta poenostavil v graf. Tako si lahko tudi kemijske strukture poenostavimo in jih pretvorimo v grafe molekul. (Gastgeiger, 2003)



Slika 9: Ponazoritev grafa Königsberških mostov z grafom

² Polarnostno število je še en indeks, ki ga je vpeljal Harold Wiener, a ni bil deležen tako velike pozornosti. Predstavlja število vseh parov ogljikovih atomov, ki se nahajajo na razdalji 3.

Smiselno je, da najprej razčlenimo nekaj osnovnih definicij, ki bodo pomagale razumeti nadaljnje definiranje Wienerjevega indeksa. Graf G sestavlja končna množica vozlišč, ki jih označimo kot $V(G)$, in množica povezav med temi vozlišči, ki jih označimo z $E(G)$. Če sta vozlišči u in v povezani, pravimo, da sta vozlišči sosednji in ju označimo z $u \sim v$. Če pri zaporedju točk $v_1, v_2 \dots v_k$ velja, da so vozlišča v_i paroma različna in $v_{i-1} \sim v_i$ za vsak $i \in \{2, \dots, k\}$, to zaporedje vozlišč imenujemo pot. Za poljubni vozlišči, med katerima obstaja pot, lahko definiramo razdaljo. Razdaljo $d_G(u, v)$ med vozliščema u in v definiramo kot število povezav po najkrajši poti, ki ju povezuje. (Gastgeiger, 2003)



Slika 10: Graf G

Vozlišči v_1 in v_3 na sliki 9 sta sosednji, zato velja $v_1 \sim v_3$. Razdalja $d_G(v_1, v_2)=2$.

2.2.2.1.1 Matrika sosednosti

Matrika sosednosti je predstavitev grafa v tekstovni obliki, ki določa, katera vozlišča so sosednja kateremu. Za graf z $[V]$ številom vozlišč je njegova matrika, podana z $A(G)$, velika $[V] \times [V]$. Matriko po navadi izpolnujemo z binarnimi vrednostmi t.j. 0 ali 1.

$$[A(G)]_{ij} = \begin{cases} 1; & \text{če sta vozlišči } i \text{ in } j \text{ sosednji} \\ 0; & \text{sicer} \end{cases}$$

V kemiji vozlišča predstavljajo atome, ne-ničelne vrednosti pa vez med dvema atomoma. Običajno uporabljamo 1 za enojne vezi, 2 za dvojne vezi in 3 za trojne vezi. Vrednosti so v matriki zapisane dvakrat, saj je matrika simetrična po ničelni diagonali.

Primer matrike sosednosti za molekulo prop-1-ena izgleda tako:

Graf 1: Graf molekule propena



$$A(G) = \begin{bmatrix} 0 & 2 & 0 \\ 2 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

2.2.2.2 Računanje Wienerjevega indeksa s pomočjo grafa molekule

Matematična definicija Wienerjevega indeksa se je oblikovala s pomočjo teorije grafov. Prvi je to storil Haruo Hosoya, ki ga je definiral kot polovico vsote elementov matrike razdalj.

Skozi leta so ugotovili, da lahko Wienerjev indeks definiramo na več različnih načinov. V nalogi smo se poslužili dveh; prvi je, da indeks izračunamo po znani matematični formuli s seštevanjem vozlišč oziroma s seštevanjem razdalj med vsemi pari povezav, drugi pa, da narišemo matriko razdalj in izračunamo polovico vsote vseh elementov.

Če želimo izračunati Wienerjev indeks molekule 2,3-dimetilbutana, moramo najprej narisati graf, da lahko iz njega razberemo razdalje med posameznimi atomi oziroma ogljiki. Ko narišemo graf molekule in oštevilčimo vse ogljikove atome, izgleda tako:



Slika 11: Pretvorba zapisa formule v graf molekule

Pri prvem načinu si pri izračunu pomagamo s formulo za vsoto razdalj med vsemi ogljiki.

$$W(G) = \sum_{i < j} d(v_i, v_j)$$

$$\begin{aligned} W(G) &= d(v_1, v_2) + d(v_1, v_3) + d(v_1, v_4) + d(v_1, v_5) + d(v_1, v_6) \\ &+ d(v_2, v_3) + d(v_2, v_4) + d(v_2, v_5) + d(v_2, v_6) \\ &+ d(v_3, v_4) + d(v_3, v_5) + d(v_3, v_6) \\ &+ d(v_4, v_5) + d(v_4, v_6) \\ &+ d(v_5, v_6) \\ &= 1+2+3+2+3 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&+ 1+2+1+2 \\
&+ 1+2+1 \\
&+ 3+2 \\
&+ 3 \\
&= 29
\end{aligned}$$

Enak rezultat pa dobimo tudi, če narišemo matriko razdalj in izračunamo polovico vsote elementov. Matriko razdalj narišemo tako, da za molekulo z N številom ogljikovih atomov izrišemo tabelo velikosti NxN. Potem vpisujemo vrednosti, kakšna razdalja (koliko vezi) je med določenima atomoma.

Matrika razdalj molekule 2,3-dimetilbutana:

$$\begin{bmatrix}
0 & 1 & 2 & 3 & 2 & 3 \\
1 & 0 & 1 & 2 & 1 & 2 \\
2 & 1 & 0 & 1 & 2 & 1 \\
3 & 2 & 1 & 0 & 3 & 2 \\
2 & 1 & 2 & 3 & 0 & 3 \\
3 & 2 & 1 & 2 & 3 & 0
\end{bmatrix}$$

$$\begin{aligned}
W(G) &= (0+1+2+3+2+3+1+0+1+2+1+2+2+1+0+1+2+1+3+2+1+0+3+2+2+1+2+3+0+3+3+2+1+2+3) : 2 \\
&= 58 : 2 \\
&= 29
\end{aligned}$$

2.2.2.3 Determinacijski koeficient oziroma R^2

R je oznaka za korelacijski koeficient, ki zavzema vrednosti na intervalu [-1, 1]. Vrednost R^2 , imenovana tudi determinacijski koeficient, nam pove stopnjo oziroma jakost povezave med spremenljivkami. Koeficient zavzema vrednosti na intervalu [0, 1], pri čemer število nič predstavlja najmanjšo stopnjo povezanosti, vrednost R^2 pa je enaka številu ena takrat, ko so podatki v popolni funkcijski povezanosti – zvezna funkcija. (Kraner Šumenjak, 2011)

Stopnja povezanosti se določa po naslednji legendi:

Tabela 1: Tabela stopnje povezanosti za posamezne vrednosti R^2

| Vrednost koeficienta R^2 | Stopnja povezanosti |
|----------------------------|-----------------------------------|
| 0 | ni povezanosti |
| 0–0,2 | neznatna povezanost |
| 0,2–0,4 | nizka oziroma šibka povezanost |
| 0,4–0,7 | srednja oziroma zmerna povezanost |
| 0,7–0,9 | visoka povezanost |
| 0,9–1 | zelo visoka povezanost |
| 1 | popolna funkcijska povezanost |

3. PRAKTIČNI DEL

Cilj raziskovalne naloge je bil ugotoviti, katero vrednost je pri računanju z alkeni najbolj smiselno vstaviti kot vrednost dvojne vezi, da bodo njihovi topološki indeksi čim boljše pojasnili lastnosti molekul. Pri tem smo se osredotočili na Wienerjev indeks, saj se alkene pri računanju le-tega običajno obravnava enako kot alkane. Zanimalo nas je, kako učinkovita je metoda, ki jo trenutno uporabljamo za računanje Wienerjevega indeksa pri alkanih za alkene.

Raziskati smo želeli tudi, če obstaja boljša metoda za izračun tega podatka.

Raziskovalnega dela smo se lotili tako, da smo najprej izračunali vse Wienerjeve indekse in jih uredili v tabelo, potem pa smo njihove vrednosti primerjali z dejanskimi vrelišči posameznega alkena in iz tega izrisali grafe. Ta postopek je opisan v nadaljevanju.

3.1 Računalniški program za izračun Wienerjevih indeksov

Kot že omenjeno, smo najprej izračunali Wienerjeve indekse za vse alkene s štirimi, petimi, šestimi, sedmimi in osmimi C atomi. Pri tem smo kmalu ugotovili, da tega sami ne bomo zmogli, zato smo s pomočjo naredili računalniški program. Program je zasnovan tako, da iz zapisa SMILES posameznega ogljikovodika in poljubne vrednosti, ki jo vnesemo za dvojno vez, izračuna Wienerjev indeks.

Primer za izračun Wienerjevega indeksa preprostega but-1-ena³:

```
(.venv) vania@LAPTOP-VU:~/Documents/program/program$ python3 main.py CCC=C 0.25
[(0, 'C'), (1, 'C'), (2, 'C'), (3, 'C')]
[(0, 1, 1), (1, 2, 1), (2, 3, 2)]
Number of C atoms: 4
matrix shape: (4, 4)
[[0.  1.  2.  2.25]
 [0.  0.  1.  1.25]
 [0.  0.  0.  0.25]
 [0.  0.  0.  0.  ]]
Wiener index: 7.75
```

Slika 12: Primer izračunanega Wienerjevega indeksa

Ko zaženemo terminal, se prikaže prazno polje. V prvo vrstico najprej zapišemo osnovni ukaz, ki je vedno enak - 'python3 main.py', da z njim zaženemo program. K osnovnemu ukazu v isto vrstico zapišemo argumenta, ki ju spreminjamo z vsakim vnesenim ukazom – zapis SMILES in vrednost za dvojno vez (rumen pravokotnik na sliki 12). Primer vnešene vrstice je torej: *python3 main.py CCC=C 0.25*.

Kar je zapisano v modrem pravokotniku, označenem na sliki 12, je prva vrstica, ki jo računalnik vrne. V njej je vsak C atom v molekuli označen s posamezno številko, kar je v pomoč pri razumevanju nadaljnjih podatkov. V naslednji vrstici (rožnat pravokotnik na sliki 12) sta znotraj enega oklepaja najprej s številkami označena dva C atoma v molekuli, tretja številka pa predstavlja tip vezi med tema atomoma (primer: (0, 1, 1) pomeni, da je med C atomom, ki je označen z 0, in C atomom, ki je označen z 1, enojna vez). Program nato prešteje C atome in izpiše njihovo število, da lahko s pomočjo tega podatka sestavi matriko. Sledi izpis polovice matrike z razdaljami med C atomi (zelen pravokotnik na sliki 12). Na koncu se izpiše podatek, ki ga pravzaprav iščemo; Wienerjev indeks določene molekule z določeno vrednostjo za dvojno vez.

³ Računalniški zapis je črno-bel, barvni okvirji so dodani le za lažjo predstavbo in razlago sistema.

3. 1. 1 Sestava programa

```
35 def main():
36     parser = argparse.ArgumentParser(description="Wiener index calculator.")
37     parser.add_argument("smiles", help="TODO")
38     parser.add_argument("double_bond", type=float, help="TODO")
39     parser.add_argument("--plot", "-p", action="store_true", help="TODO")
40
41     args = parser.parse_args()
42
43     smiles = args.smiles
44     single_bond = 1
45     double_bond = args.double_bond
46     mol = read_smiles(smiles)
47
48     elements = mol.nodes(data='element')
49     orders = mol.edges(data='order')
50
51     print(elements)
52     print(orders)
53
54     matrix = calc_matrix(elements, orders, single_bond, double_bond, args.plot)
55     print(matrix)
56     wiener_index = matrix.sum()
57     print("Wiener index: {}".format(wiener_index))
58
59     if args.plot:
60         plt.show()
61
```

Slika 13: Izpis programske kode programa

Program v prvem koraku z razčlenjevalnikom (vrstica 36 na sliki 13) razčleni argumente, ki predstavljajo vhodne podatke v glavni del programa. V naslednjih treh vrsticah (37-39) so zapisani argumenti, ki definirajo parametre razčlenjevalnika. Najprej zapišemo SMILES zapis molekule, potem vrednost za dvojno vez ter če želimo iz zapisa SMILES narisati graf molekule, zapišemo še argument '--plot' oziroma '-p'. V vrstici 41 se vnesenim argumentom določijo dejanske vrednosti. V vrstici 43 določimo iz začetne vrstice, ki smo jo vpisali, podatke zapisa SMILES, za katerega želimo izračunati Wienerjev indeks. Za enojno vez ('single_bond') upoštevamo vrednost 1, za dvojno vez ('double_bond') uporabimo vrednost iz argumenta oziroma vrednost, ki jo vpišemo. V 46. vrstici je zapisano, da zapis SMILES definiramo s pomočjo knjižice, ki je že nameščena na računalnik. V 48. vrstici določimo, da so elementi, ki jih prepoznamo iz zapisa SMILES, dejansko vozlišča v grafu, vezi pa povezave med njimi. Nato sta zapisani prvi vrstici, ki jih program izpiše kot rezultat; najprej so urejeni in s številko določeni C atomi, potem pa še druga vrstica, ki izpiše vez med posameznima C atomoma. V 54. vrstici določimo matriko (programska koda določitve matrike je podana na sliki 14). Sledi izpis vrednosti matrike, seštevanje vrednosti matrike (56. vrstica) in izpis rezultata - Wienerjevega indeksa. V kolikor smo v vrstici vhodnih podatkov določili argumenta '--plot' oziroma '-p', se v vrstici 59 izriše še graf.

```

1 import argparse
2 import matplotlib.pyplot as plt
3 import networkx as nx
4 import numpy as np
5 from pysmiles import read_smiles
6
7
8 def calc_matrix(elements, orders, single_bond, double_bond, plot):
9     # (1, 2, 1) -> (1, 2, single_bond)
10    # (3, 4, 2) -> (3, 4, double_bond)
11    orders = [(e[0], e[1], double_bond) if e[2] == 2 else (e[0], e[1], single_bond)
12              for e in orders]
13
14    c_count = len(elements)
15    print("Number of C atoms: {}".format(c_count))
16
17    matrix = np.zeros((c_count, c_count))
18    print("matrix shape: {}".format(matrix.shape))
19
20    g = nx.Graph()
21    g.add_weighted_edges_from(orders)
22
23    if plot:
24        colors = [(1, 0, 0) if e[2] == double_bond else (0, 0, 0)
25                 for e in orders]
26        nx.draw(g, edge_color=colors, width=2)
27
28        for i in range(c_count):
29            for j in range(i + 1, c_count):
30                matrix[i, j] = nx.dijkstra_path_length(g, i, j)
31
32    return matrix
33

```

Slika 14: Sestava programske kode

Slika 14 podaja programsko kodo za definiranje matrike. Najprej definiramo osnovne parametre matrike in način definiranja vrednosti; če je med vozlišči enojna vez, to definiramo kot 'single_bond', če je dvojna, jo definiramo kot 'double_bond' (primer: (1, 2, 1) zapišemo kot (1, 2, single_bond)). Sledi preštevanje in izpis C atomov. Naslednji korak je izpis vrednosti matrike, ki jo inicializiramo z vrednostmi nič in izpišemo. V vrsticah 20 in 21 shranimo podatka, s katerima definiramo, da vrednosti poti med posameznimi atomi računamo s pomočjo grafa (in ne le kot razliko posameznih dveh števil, s katerima sta označena C atoma). V vrsticah 23 do 26 določimo, da če smo v začetno vrstico vnesli argument za skico grafa, se bo graf narisal skladno z vrednostmi podanih parametrov v teh vrsticah; da C atome nariše kot točke, povezave med temi točkami pa označuje z različnimi barvami glede na tip vezi. V naslednjem koraku določimo, da izvedemo samo pol matrike, saj le to potrebujemo za izračun Wienerjevega indeksa. Z i in j sta označeni osi matrike. Z izvajanjem zank v vrsticah 28 in 29 določimo za indeks i vse možnosti, za j pa samo tiste, ki ustrezajo pogoju $i + 1$, kar privede do določitve le želene polovice vrednosti matrike. V vrstici 32 vrednosti matrike vrnemo v glavni program, kjer njene vrednosti izpišemo.

V raziskovalni nalogi smo se osredotočili na tiste alkene, ki imajo v molekuli od štiri do osem ogljikovih atomov in eno dvojno vez. Najprej smo poiskali več kot sto strukturnih izomerov (optične izomerije pri tem nismo upoštevali), potem pa za vsakega izmed njih za vsako

posamezno vrednost, ki smo jo vstavili namesto števila ena pri dvojni vezi, izračunali Wienerjev indeks. Vstavljali smo vrednosti od 0,25 do 2,75, s korakom 0,25. Ko smo izračunali vse Wienerjeve indekse, smo jih uredili v tabelo, da so bili podatki pregledno zapisani.

Tabela:

| n=4 | SMILES | WI (x=0,25) | WI (x=0,5) | WI (x=0,75) | WI (x=1) | WI (x=1,25) | WI (x1,5) | WI (x=1,75) | WI (x=2) | WI (x=2,25) | WI (x=2,5) | WI (x=2,75) |
|------------------|----------|-------------|------------|-------------|----------|-------------|-----------|-------------|----------|-------------|------------|-------------|
| BUT-1-EN | CCC=C | 7,75 | 8,5 | 9,25 | 10 | 10,75 | 11,5 | 12,25 | 13 | 13,75 | 14,5 | 15,25 |
| BUT-2-EN | CC=CC | 7 | 8 | 9 | 10 | 11 | 12 | 13 | 14 | 15 | 16 | 17 |
| 2-METILPROP-1-EN | CC(=C)C | 6,75 | 7,5 | 8,25 | 9 | 9,75 | 10,5 | 11,25 | 12 | 12,75 | 13,5 | 14,25 |
| n=5 | | | | | | | | | | | | |
| PENT-1-EN | CCCC=C | 17 | 18 | 19 | 20 | 21 | 22 | 23 | 24 | 25 | 26 | 27 |
| PENT-2-EN | CCC=CC | 15,5 | 17 | 18,5 | 20 | 21,5 | 23 | 24,5 | 26 | 27,5 | 29 | 30,5 |
| 2-METILBUT-1-EN | CCC(=C)C | 15 | 16 | 17 | 18 | 19 | 20 | 21 | 22 | 23 | 24 | 25 |
| 3-METILBUT-1-EN | CC(C)C=C | 15 | 16 | 17 | 18 | 19 | 20 | 21 | 22 | 23 | 24 | 25 |
| 2-METILBUT-2-EN | CC=C(C)C | 13,5 | 15 | 16,5 | 18 | 19,5 | 21 | 22,5 | 24 | 25,5 | 27 | 28,5 |

Slika 15: Zaslonski posnetek izseka tabele z izračunanimi Wienerjevimi indeksi za posamezne vrednost - stran 1

| n=6 | | | | | | | | | | | | |
|---------------------|-------------|-------|------|-------|----|-------|------|-------|----|-------|------|-------|
| HEKS-1-EN | CCCCC=C | 31,25 | 32,5 | 33,75 | 35 | 36,25 | 37,5 | 38,75 | 40 | 41,25 | 42,5 | 43,75 |
| HEKS-2-EN | CCCC=CC | 29 | 31 | 33 | 35 | 37 | 39 | 41 | 43 | 45 | 47 | 49 |
| HEKS-3-EN | CCC=CCC | 28,25 | 30,5 | 32,75 | 35 | 37,25 | 39,5 | 41,75 | 44 | 46,25 | 48,5 | 50,75 |
| 2-METILPENT-1-EN | CCCC(=C)C | 28,25 | 29,5 | 30,75 | 32 | 33,25 | 34,5 | 35,75 | 37 | 38,25 | 39,5 | 40,75 |
| 3-METILPENT-1-EN | CCC(C)C=C | 27,25 | 28,5 | 29,75 | 31 | 32,25 | 33,5 | 34,75 | 36 | 37,25 | 38,5 | 39,75 |
| 4-METILPENT-1-EN | CC(C)CC=C | 27,25 | 28,5 | 29,75 | 31 | 32,25 | 33,5 | 34,75 | 36 | 37,25 | 38,5 | 39,75 |
| 2,3-DIMETILBUT-1-EN | CC(C)C(=C)C | 25,25 | 26,5 | 27,75 | 29 | 30,25 | 31,5 | 32,75 | 34 | 35,25 | 36,5 | 37,75 |
| 3,3-DIMETILBUT-1-EN | CC(C)(C)C=C | 24,25 | 25,5 | 26,75 | 28 | 29,25 | 30,5 | 31,75 | 33 | 34,25 | 35,5 | 36,75 |
| 2-METILPENT-2-EN | CCCC(=C)C | 28,25 | 29,5 | 30,75 | 32 | 33,25 | 34,5 | 35,75 | 37 | 38,25 | 39,5 | 40,75 |
| 3-METILPENT-2-EN | CCC(C)C=C | 27,25 | 28,5 | 29,75 | 31 | 32,25 | 33,5 | 34,75 | 36 | 37,25 | 38,5 | 39,75 |

Slika 16: Zaslonski posnetek izseka tabele z izračunanimi Wienerjevimi indeksi za posamezne vrednost - stran 2

| | | | | | | | | | | | | |
|---------------------|-------------|-------|------|-------|----|-------|------|-------|----|-------|------|-------|
| 4-METILPENT-2-EN | CC=CC(C)C | 26 | 28 | 30 | 32 | 34 | 36 | 38 | 40 | 42 | 44 | 46 |
| 2,3-DIMETILBUT-2-EN | CC(C)=C(C)C | 26 | 28 | 30 | 32 | 34 | 36 | 38 | 40 | 42 | 44 | 46 |
| 2-ETILBUT-1-EN | CCC(C)CC | 27,25 | 28,5 | 29,75 | 31 | 32,25 | 33,5 | 34,75 | 36 | 37,25 | 38,5 | 39,75 |
| 3,3-DIMETILBUT-1-EN | CC(C)(C)C=C | 24,25 | 25,5 | 26,75 | 28 | 29,25 | 30,5 | 31,75 | 33 | 34,25 | 35,5 | 36,75 |
| n=7 | | | | | | | | | | | | |
| HEPT-1-EN | C=CCCCCC | 51,5 | 53 | 54,5 | 56 | 57,5 | 59 | 60,5 | 62 | 63,5 | 65 | 66,5 |
| HEPT-2-EN | CCCCCC=CC | 48,5 | 51 | 53,5 | 56 | 58,5 | 61 | 63,5 | 66 | 68,5 | 71 | 73,5 |
| HEPT-3-EN | CCCC=CCC | 47 | 50 | 53 | 56 | 59 | 62 | 65 | 68 | 71 | 74 | 77 |
| 2-METILHEKS-1-EN | CCCCC(C)=C | 47,5 | 49 | 50,5 | 52 | 53,5 | 55 | 56,5 | 58 | 59,5 | 61 | 62,5 |
| 3-METILHEKS-1-EN | CCCC(C)C=C | 45,5 | 47 | 48,5 | 50 | 51,5 | 53 | 54,5 | 56 | 57,5 | 59 | 60,5 |
| 4-METILHEKS-1-EN | CCC(C)CC=C | 45,5 | 47 | 48,5 | 50 | 51,5 | 53 | 54,5 | 56 | 57,5 | 59 | 60,5 |

Slika 17: Zaslonski posnetek izseka tabele z izračunanimi Wienerjevimi indeksi za posamezne vrednost - stran 3

| | | | | | | | | | | | | |
|----------------------|---------------|------|----|------|----|------|----|------|----|------|----|------|
| 5-METILHEKS-1-EN | CC(C)CCC=C | 47,5 | 49 | 50,5 | 52 | 53,5 | 55 | 56,5 | 58 | 59,5 | 61 | 62,5 |
| 2,3-DIMETILPENT-1-EN | CCC(C)C(C)=C | 41,5 | 43 | 44,5 | 46 | 47,5 | 49 | 50,5 | 52 | 53,5 | 55 | 56,5 |
| 2,4-DIMETILPENT-1-EN | CC(C)CC(C)=C | 43,5 | 45 | 46,5 | 48 | 49,5 | 51 | 52,5 | 54 | 55,5 | 57 | 58,5 |
| 3,3-DIMETILPENT-1-EN | CCC(C)(C)C=C | 39,5 | 41 | 42,5 | 44 | 45,5 | 47 | 48,5 | 50 | 51,5 | 53 | 54,5 |
| 3,4-DIMETILPENT-1-EN | CC(C)C(C)C=C | 41,5 | 43 | 44,5 | 46 | 47,5 | 49 | 50,5 | 52 | 53,5 | 55 | 56,5 |
| 4,4-DIMETILPENT-1-EN | CC(C)(C)CC=C | 41,5 | 43 | 44,5 | 46 | 47,5 | 49 | 50,5 | 52 | 53,5 | 55 | 56,5 |
| 2,3-DIMETILPENT-2-EN | CCC(C)=C(C)C | 37 | 40 | 43 | 46 | 49 | 52 | 55 | 58 | 61 | 64 | 67 |
| 3,4-DIMETILPENT-2-EN | CC=C(C)C(C)C | 38,5 | 41 | 43,5 | 46 | 48,5 | 51 | 53,5 | 56 | 58,5 | 61 | 63,5 |
| 4,4-DIMETILPENT-2-EN | CC=CC(C)C(C)C | 38,5 | 41 | 43,5 | 46 | 48,5 | 51 | 53,5 | 56 | 58,5 | 61 | 63,5 |
| 2,4-DIMETILPENT-2-EN | CC(C)C=C(C)C | 39 | 42 | 45 | 48 | 51 | 54 | 57 | 60 | 63 | 66 | 69 |
| 2-METILHEKS-3-EN | CCC=CC(C)C | 43 | 46 | 49 | 52 | 55 | 58 | 61 | 64 | 67 | 70 | 73 |

Slika 18: Zaslonski posnetek izseka tabele z izračunanimi Wienerjevimi indeksi za posamezne vrednost - stran 4

| | | | | | | | | | | | | |
|------------------------|----------------|------|----|------|----|------|----|------|----|------|----|------|
| 3-METILHEKS-3-EN | CCC=C(C)CC | 41 | 44 | 47 | 50 | 53 | 56 | 59 | 62 | 65 | 68 | 71 |
| 4-METILHEKS-2-EN | CCC(C)C=CC | 42,5 | 45 | 47,5 | 50 | 52,5 | 55 | 57,5 | 60 | 62,5 | 65 | 67,5 |
| 5-METILHEKS-2-EN | CC=CCC(C)C | 44,5 | 47 | 49,5 | 52 | 54,5 | 57 | 59,5 | 62 | 64,5 | 67 | 69,5 |
| 2,3,3-TRIMETILBUT-1-EN | CC(=C)C(C)(C)C | 37,5 | 39 | 40,5 | 42 | 43,5 | 45 | 46,5 | 48 | 49,5 | 51 | 52,5 |
| 2-ETILPENT-1-EN | CCCC(=C)CC | 45,5 | 47 | 48,5 | 50 | 51,5 | 53 | 54,5 | 56 | 57,5 | 59 | 60,5 |
| 2-ETIL-3-METILBUT-1-EN | CCC(=C)C(C)C | 41,5 | 43 | 44,5 | 46 | 47,5 | 49 | 50,5 | 52 | 53,5 | 55 | 56,5 |
| 2-METILHEKS-2-EN | CCCC=C(C)C | 43 | 46 | 49 | 52 | 55 | 58 | 61 | 64 | 67 | 70 | 73 |
| 3-ETILPENT-1-EN | CCC(CC)C=C | 43,5 | 45 | 46,5 | 48 | 49,5 | 51 | 52,5 | 54 | 55,5 | 57 | 58,5 |
| 3-ETILPENT-2-EN | CCC(CC)=CC | 40,5 | 43 | 45,5 | 48 | 50,5 | 53 | 55,5 | 58 | 60,5 | 63 | 65,5 |
| $n=8$ | | | | | | | | | | | | |
| 4,4-DIMETILHEKS-2-EN | CCC(C)(C)C=CC | 58 | 61 | 64 | 67 | 70 | 73 | 76 | 79 | 82 | 85 | 88 |

Slika 19: Zaslonki posnetek izseka tabele z izračunanimi Wienerjevimi indeksi za posamezne vrednost - stran 5

| | | | | | | | | | | | | |
|-------------------------|-----------------|-------|------|-------|----|-------|------|-------|-----|-------|------|-------|
| 2,4-DIMETILHEKS-3-EN | CCC(C)=CC(C)C | 59 | 63 | 67 | 71 | 75 | 79 | 83 | 87 | 91 | 95 | 99 |
| 2,5-DIMETILHEKS-3-EN | CC(C)C=CC(C)C | 62 | 66 | 70 | 74 | 78 | 82 | 86 | 90 | 94 | 98 | 102 |
| 3,4,4-TRIMETILPENT-2-EN | CC=C(C)C(C)(C)C | 54 | 57 | 60 | 63 | 66 | 69 | 72 | 75 | 78 | 81 | 84 |
| 3,4-DIMETILHEKS-3-EN | CCC(C)=C(C)CC | 56 | 60 | 64 | 68 | 72 | 76 | 80 | 84 | 88 | 92 | 96 |
| 3,5-DIMETILHEKS-2-EN | CC=C(C)CC(C)C | 62 | 65 | 68 | 71 | 74 | 77 | 80 | 83 | 86 | 89 | 92 |
| 3-ETIL-4-METILPENT-2-EN | CCC(=CC)C(C)C | 58 | 61 | 64 | 67 | 70 | 73 | 76 | 79 | 82 | 85 | 88 |
| OKT-4-EN | CCCC=CCCC | 72 | 76 | 80 | 84 | 88 | 92 | 96 | 100 | 104 | 108 | 112 |
| OKT-1-EN | CCCCCCC=C | 78,75 | 80,5 | 82,25 | 84 | 85,75 | 87,5 | 89,25 | 91 | 92,75 | 94,5 | 96,25 |
| 2,3,3-TRIMETILPENT-1-EN | CCC(C)(C)C(C)=C | 56,75 | 58,5 | 60,25 | 62 | 63,75 | 65,5 | 67,25 | 69 | 70,75 | 72,5 | 74,25 |
| 2,3,4-TRIMETILPENT-1-EN | CC(C)C(C)C(C)=C | 59,75 | 61,5 | 63,25 | 65 | 66,75 | 68,5 | 70,25 | 72 | 73,75 | 75,5 | 77,25 |
| 2,3,4-TRIMETILPENT-2-EN | CC(C)C(C)=C(C)C | 53,75 | 57,5 | 61,25 | 65 | 68,75 | 72,5 | 76,25 | 80 | 83,75 | 87,5 | 91,25 |

Slika 20: Zaslonki posnetek izseka tabele z izračunanimi Wienerjevimi indeksi za posamezne vrednost - stran 6

| | | | | | | | | | | | | |
|----------------------------|----------------|-------|------|-------|----|-------|------|-------|----|-------|------|--------|
| 2,3-DIMETILHEKS-1-EN | CCCC(C)C=C | 64,75 | 66,5 | 68,25 | 70 | 71,75 | 73,5 | 75,25 | 77 | 78,75 | 80,5 | 82,25 |
| 2,3-DIMETILHEKS-2-EN | CCCC(C)=C(C)C | 58,75 | 62,5 | 66,25 | 70 | 73,75 | 77,5 | 81,25 | 85 | 88,75 | 92,5 | 96,25 |
| 2,4,4-TRIMETILPENT-1-EN | CC(C)CC(C)(C)C | 60,75 | 62,5 | 64,25 | 66 | 67,75 | 69,5 | 71,25 | 73 | 74,75 | 76,5 | 78,25 |
| 2,4,4-TRIMETILPENT-2-EN | CC(C)=CC(C)C | 54,75 | 58,5 | 62,25 | 66 | 69,75 | 73,5 | 77,25 | 81 | 84,75 | 88,5 | 92,25 |
| 2,4-DIMETILHEKS-1-EN | CCC(C)CC(C)=C | 59,75 | 63,5 | 67,25 | 71 | 74,75 | 78,5 | 82,25 | 86 | 89,75 | 93,5 | 97,25 |
| 2,4-DIMETILHEKS-2-EN | CCC(C)C=C(C)C | 59,75 | 63,5 | 67,25 | 71 | 74,75 | 78,5 | 82,25 | 86 | 89,75 | 93,5 | 97,25 |
| 2,5-DIMETILHEKS-1-EN | CC(C)CCC(C)=C | 68,75 | 70,5 | 72,25 | 74 | 75,75 | 77,5 | 79,25 | 81 | 82,75 | 84,5 | 86,25 |
| 2,5-DIMETILHEKS-2-EN | CC(C)CC=C(C)C | 62,75 | 66,5 | 70,25 | 74 | 77,75 | 81,5 | 85,25 | 89 | 92,75 | 96,5 | 100,25 |
| 2-ETILHEKS-1-EN | CCCCC=C(C)C | 70,75 | 72,5 | 74,25 | 76 | 77,75 | 79,5 | 81,25 | 83 | 84,75 | 86,5 | 88,25 |
| 2-ETIL-3,3-DIMETILBUT-1-EN | CCC(C)C(C)(C)C | 57,75 | 59,5 | 61,25 | 63 | 64,75 | 66,5 | 68,25 | 70 | 71,75 | 73,5 | 75,25 |
| 2-ETIL-3-METILPENT-1-EN | CCC(C)C=C(C)CC | 62,75 | 64,5 | 66,25 | 68 | 69,75 | 71,5 | 73,25 | 75 | 76,75 | 78,5 | 80,25 |
| 2-ETIL-4-METILPENT-1-EN | CCC(C)CC(C)C | 65,75 | 67,5 | 69,25 | 71 | 72,75 | 74,5 | 76,25 | 78 | 79,75 | 81,5 | 83,25 |

Slika 21: Zaslonski posnetek izseka tabele z izračunanimi Wienerjevimi indeksi za posamezne vrednost - stran 7

| | | | | | | | | | | | | |
|-----------------------------|------------------|-------|------|-------|------|-------|------|-------|------|-------|-------|--------|
| 2-ETIL-4-METILPENT-1-EN | CCC(C)CC(C)C | 65,75 | 67,5 | 69,25 | 71 | 72,75 | 74,5 | 76,25 | 78 | 79,75 | 81,5 | 83,25 |
| 2-IZOPROPILPENT-1-EN | CCCC(C)C(C)C | 64,75 | 66,5 | 68,25 | 70 | 71,75 | 73,5 | 75,25 | 77 | 78,75 | 80,5 | 82,25 |
| 2-IZOPROPIL-3-METILBUT-1-EN | CC(C)C=C(C)C(C)C | 59,75 | 61,5 | 63,25 | 65 | 66,75 | 68,5 | 70,25 | 72 | 73,75 | 75,5 | 77,25 |
| 2-METILHEPT-1-EN | CCCCC(C)=C | 73,5 | 75,5 | 77,5 | 79,5 | 81,5 | 83,5 | 85,5 | 87,5 | 89,5 | 91,5 | 93,5 |
| 2-METILHEP-2-EN | CCCCC=C(C)C | 67,75 | 71,5 | 75,25 | 79 | 82,75 | 86,5 | 90,25 | 94 | 97,75 | 101,5 | 105,25 |
| 2-PROPILPENT-1-EN | CCCC(C)CCC | 69,75 | 71,5 | 73,25 | 75 | 76,75 | 78,5 | 80,25 | 82 | 83,75 | 85,5 | 87,25 |
| 3,3,4-TRIMETILPENT-1-EN | CC(C)C(C)(C)C=C | 56,75 | 58,5 | 60,25 | 62 | 63,75 | 65,5 | 67,25 | 69 | 70,75 | 72,5 | 74,25 |
| 3,3-DIMETILHEKS-1-EN | CCCC(C)C=C | 61,75 | 63,5 | 65,25 | 67 | 68,75 | 70,5 | 72,25 | 74 | 75,75 | 77,5 | 79,25 |
| 3,4,4-TRIMETILPENT-1-EN | CC(C=C)C(C)C | 57,75 | 59,5 | 61,25 | 63 | 64,75 | 66,5 | 68,25 | 70 | 71,75 | 73,5 | 75,25 |
| 3,4-DIMETILHEKS-1-EN | CCC(C)C(C)=C | 62,75 | 64,5 | 66,25 | 68 | 69,75 | 71,5 | 73,25 | 75 | 76,75 | 78,5 | 80,25 |
| 3,5-DIMETILHEKS-1-EN | CC(C)CC(C)C=C | 65,75 | 67,5 | 69,25 | 71 | 72,75 | 74,5 | 76,25 | 78 | 79,75 | 81,5 | 83,25 |

Slika 22: Zaslonski posnetek izseka tabele z izračunanimi Wienerjevimi indeksi za posamezne vrednost - stran 8

| | | | | | | | | | | | | |
|-------------------------|---------------|-------|------|-------|------|-------|------|-------|------|-------|------|-------|
| 3,5-DIMETILHEKS-2-EN | CC=C(C)CC(C)C | 62 | 65 | 68 | 71 | 74 | 77 | 80 | 83 | 86 | 89 | 92 |
| 3-ETILHEKS-1-EN | CCCC(C)C=C | 66,75 | 68,5 | 70,25 | 72 | 73,75 | 75,5 | 77,25 | 79 | 80,75 | 82,5 | 84,25 |
| 3-ETIL-2-METILPENT-1-EN | CCC(C)C(C)C=C | 61,75 | 63,5 | 65,25 | 67 | 68,75 | 70,5 | 72,25 | 74 | 75,75 | 77,5 | 79,25 |
| 3-ETIL-2-METILPENT-2-EN | CCC(C)C(C)C | 55,75 | 59,5 | 63,25 | 67 | 70,75 | 74,5 | 78,25 | 82 | 85,75 | 89,5 | 93,25 |
| 3-ETILHEKS-3-EN | CCC=C(C)CC | 60,75 | 64,5 | 68,25 | 72 | 75,75 | 79,5 | 83,25 | 87 | 90,75 | 94,5 | 98,25 |
| 3-ETIL-3-METILPENT-1-EN | CCC(C)(C)C=C | 58,75 | 60,5 | 62,25 | 64 | 65,75 | 67,5 | 69,25 | 71 | 72,75 | 74,5 | 76,25 |
| 3-ETIL-4-METILPENT-1-EN | CCC(C=C)C(C)C | 61,75 | 63,5 | 65,25 | 67 | 68,75 | 70,5 | 72,25 | 74 | 75,75 | 77,5 | 79,25 |
| 3-METILHEPT-1-EN | CCCCC(C)C=C | 70,5 | 72,5 | 74,5 | 76,5 | 78,5 | 80,5 | 82,5 | 84,5 | 86,5 | 88,5 | 90,5 |
| 3-METILHEPT-2-EN | CCCCC(C)=CC | 67 | 70 | 73 | 76 | 79 | 82 | 85 | 88 | 91 | 94 | 97 |
| 4,4-DIMETILHEKS-1-EN | CCC(C)(C)CC=C | 61,75 | 63,5 | 65,25 | 67 | 68,75 | 70,5 | 72,25 | 74 | 75,75 | 77,5 | 79,25 |
| 4,5-DIMETILHEKS-1-EN | CC(C)C(C)CC=C | 64,75 | 66,5 | 68,25 | 70 | 71,75 | 73,5 | 75,25 | 77 | 78,75 | 80,5 | 82,25 |

Slika 23: Zaslonski posnetek izseka tabele z izračunanimi Wienerjevimi indeksi za posamezne vrednost - stran 9

| | | | | | | | | | | | | |
|----------------------|---------------|-------|------|-------|------|-------|------|-------|-------|-------|-------|-------|
| 4-ETILHEKS-1-EN | CCC(C)CC=C | 66,75 | 68,5 | 70,25 | 72 | 73,75 | 75,5 | 77,25 | 79 | 80,75 | 82,5 | 84,25 |
| 4-METILHEPT-1-EN | CCCC(C)CC=C | 69,75 | 71,5 | 73,25 | 75 | 76,75 | 78,5 | 80,25 | 82 | 83,75 | 85,5 | 87,25 |
| 5,5-DIMETILHEKS-1-EN | CC(C)(C)CCC=C | 65,75 | 67,5 | 69,25 | 71 | 72,75 | 74,5 | 76,25 | 78 | 79,75 | 81,5 | 83,25 |
| 5-METILHEPT-1-EN | CCC(C)CCC=C | 70,75 | 72,5 | 74,25 | 76 | 77,75 | 79,5 | 81,25 | 83 | 84,75 | 86,5 | 88,25 |
| 6-METILHEPT-1-EN | CC(C)CCCC=C | 73,75 | 75,5 | 77,25 | 79 | 80,75 | 82,5 | 84,25 | 86 | 87,75 | 89,5 | 91,25 |
| 2,2-DIMETILHEKS-3-EN | CCC=CC(C)(C)C | 59,75 | 63,5 | 67,25 | 71 | 74,75 | 78,5 | 82,25 | 86 | 89,75 | 93,5 | 97,25 |
| 2-METILHEPT-3-EN | CCCC=CC(C)C | 67 | 71 | 75 | 79 | 83 | 87 | 91 | 95 | 99 | 103 | 107 |
| OKT-3-EN | CCCCC=CCC | 72,5 | 76,5 | 80,5 | 84,5 | 88,5 | 92,5 | 96,5 | 100,5 | 104,5 | 108,5 | 112,5 |
| 4,4-DIMETILHEKS-2-EN | CCC(C)(C)C=CC | 58 | 61 | 64 | 67 | 70 | 73 | 76 | 79 | 82 | 85 | 88 |
| 4,5-DIMETILHEKS-2-EN | CC=CC(C)C(C)C | 61 | 64 | 67 | 70 | 73 | 76 | 79 | 82 | 85 | 88 | 91 |
| 4-ETILHEKS-2-EN | CCC(C)C=CC | 63 | 66 | 69 | 72 | 75 | 78 | 81 | 84 | 87 | 90 | 93 |

Slika 24: Zaslonski posnetek izseka tabele z izračunanimi Wienerjevimi indeksi za posamezne vrednost - stran 10

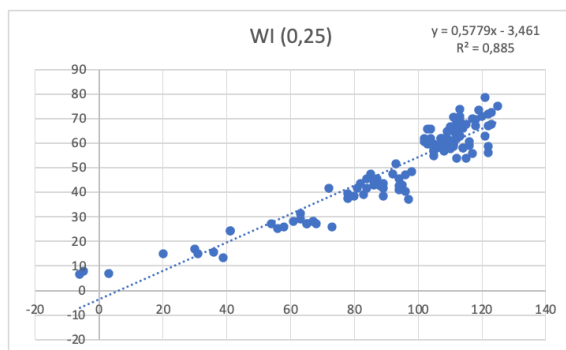
| | | | | | | | | | | | | | |
|----------------------|------------------------------|-------|-------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|-----|--------|--------|--------|
| 4-METILHEPT-2-EN | <chem>CCCC(C)C=CC</chem> | | 66 | 69 | 72 | 75 | 78 | 81 | 84 | 87 | 90 | 93 | 96 |
| 5,5-DIMETILHEKS-2-EN | <chem>CC=C(CC(C)(C)C)</chem> | | 62 | 65 | 68 | 71 | 74 | 77 | 80 | 83 | 86 | 89 | 92 |
| 5-METILHEPT-2-EN | <chem>CCC(C)CC=CC</chem> | | 67 | 70 | 73 | 76 | 79 | 82 | 85 | 88 | 91 | 94 | 97 |
| 5-METILHEPT-3-EN | <chem>CCC=CC(C)CC</chem> | | 64,75 | 68,5 | 72,25 | 76 | 79,75 | 83,5 | 87,25 | 91 | 94,75 | 98,5 | 102,25 |
| 6-METILHEPT-2-EN | <chem>CC=CCCC(C)C</chem> | | 70 | 73 | 76 | 79 | 82 | 85 | 88 | 91 | 94 | 97 | 100 |
| 6-METILHEPT-3-EN | <chem>CCC=CCC(C)C</chem> | | 67,75 | 71,5 | 75,25 | 79 | 82,75 | 86,5 | 90,25 | 94 | 97,75 | 101,5 | 105,25 |
| OKTEN-2-EN | <chem>CCCCC=CC</chem> | | 75 | 78 | 81 | 84 | 87 | 90 | 93 | 96 | 99 | 102 | 105 |
| 3-ETILHEKS-2-EN | <chem>CCCC(CC)=CC</chem> | | 63 | 66 | 69 | 72 | 75 | 78 | 81 | 84 | 87 | 90 | 93 |
| 3,4-DIMETILHEKS-2-EN | <chem>CCC(C)(C)C=CC</chem> | | 59 | 62 | 65 | 68 | 71 | 74 | 77 | 80 | 83 | 86 | 89 |
| | | R^2 | 0,885 | 0,8965 | 0,9042 | 0,9081 | 0,9092 | 0,9081 | 0,9043 | 0,9 | 0,8927 | 0,8866 | 0,877 |

Slika 25: Zaslonski posnetek izseka tabele z izračunanimi Wienerjevimi indeksi za posamezne vrednost - stran 11

Za vsako molekulo smo poiskali tudi temperaturo vrelišča⁴. Podatki o vreliščih so bili skupaj z Wienerjevimi indeksi osnova za definiranje diagramov, kjer vrelišča predstavljajo neodvisne spremenljivke, Wienerjevi indeksi pa odvisne spremenljivke. Tako smo izrisali razpršene diagrame, na te pa vstavili premico najboljšega priloga (imenovano tudi črta drsečega priloga ali regresijska črta), ki je v pomoč pri proučevanju korelacije med spremenljivkama. Vstavili smo tudi prikaz vrednosti R^2 , na podlagi katerih smo izbrali najprimernejšo vrednost, ki bi lahko nadomestila dvojno vez.

Primer diagrama:

Graf 2: Primer diagrama vrelišč z vrisano regresijsko premico.



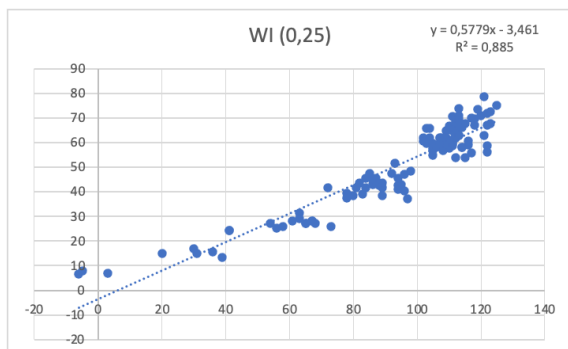
⁴ Podatke za vrelišča smo povzeli s spletne strani www.stenutz.eu, najti pa je mogoče tudi podatke, ki se rahlo razlikujejo.

4. REZULTATI IN UGOTOVITVE

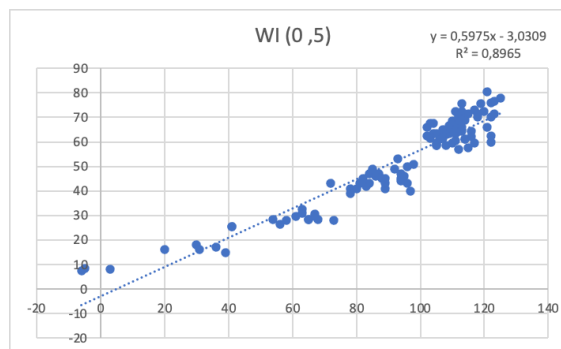
4.1 REZULTATI REGRESIJSKE PREMICE

V zgodovini so si pri risanju grafov z vrelišči alkanov pomagali z regresijsko premico, zato smo tudi pri risanju diagramov alkenov najprej vrisali le-to. Pri tem smo dobili naslednje diagrame:

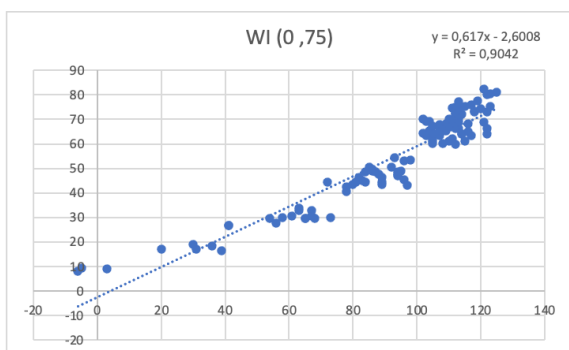
Graf 3: Regresijska premica pri vrednosti dvojne vezi 0,25.



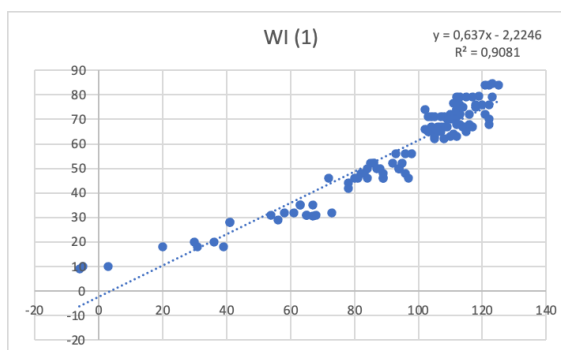
Graf 4: Regresijska premica pri vrednosti dvojne vezi 0,5.



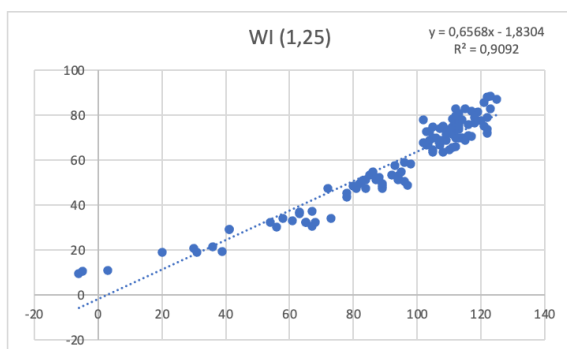
Graf 5: Regresijska premica pri vrednosti dvojne vezi 0,75.



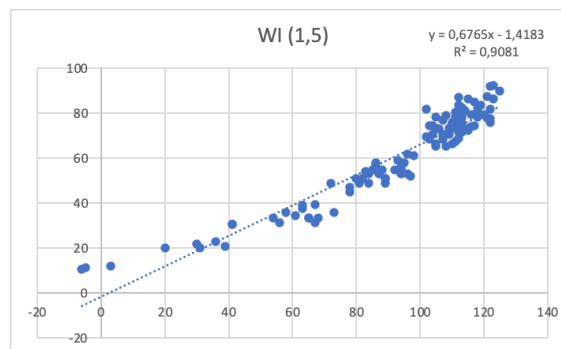
Graf 6: Regresijska premica pri vrednosti dvojne vezi 1.



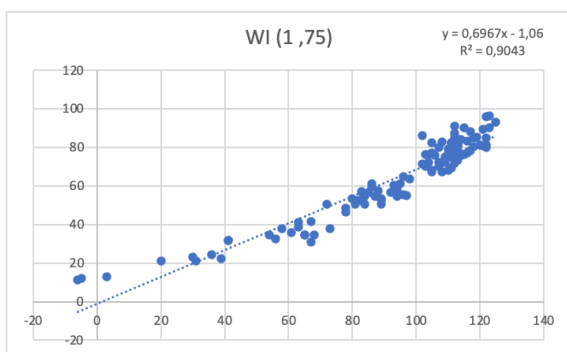
Graf 7: Regresijska premica pri vrednosti dvojne vezi 1,25.



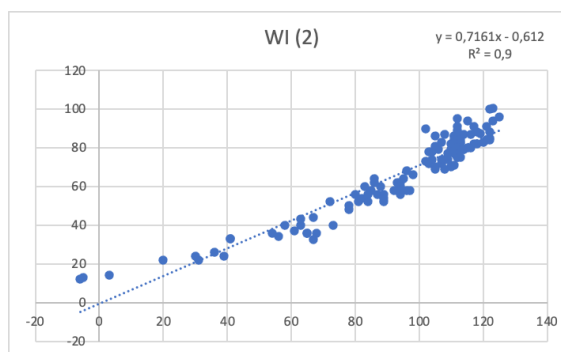
Graf 8: Regresijska premica pri vrednosti dvojne vezi 1,5.



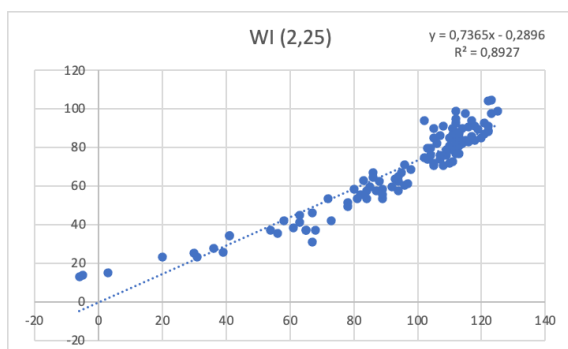
Graf 9: Regresijska premica pri vrednosti dvojne vezi 1,75.



Graf 10: Regresijska premica pri vrednosti dvojne vezi 2.



Graf 11: Regresijska premica pri vrednosti dvojne vezi 2,25.



Graf 12: Regresijska premica pri vrednosti dvojne vezi 2,5.

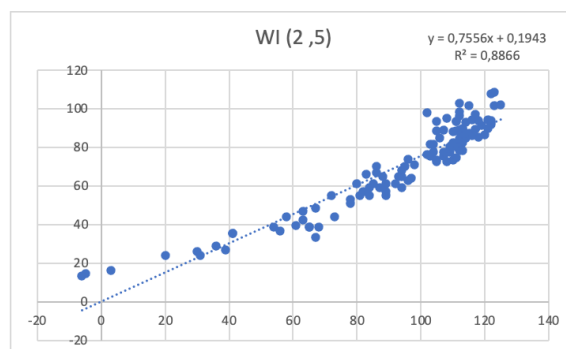


Tabela 2: Tabela rezultatov za linearno funkcijo

| VREDNOST DVOJNE VEZI | R^2 ZA LINEARNO FUNKCIJO |
|----------------------|----------------------------|
| 0,25 | 0,855 |
| 0,5 | 0,8965 |
| 0,75 | 0,9042 |
| 1 | 0,9081 |
| 1,25 | 0,9092 |
| 1,5 | 0,9081 |
| 1,75 | 0,9043 |
| 2 | 0,9 |
| 2,25 | 0,8927 |
| 2,5 | 0,8866 |

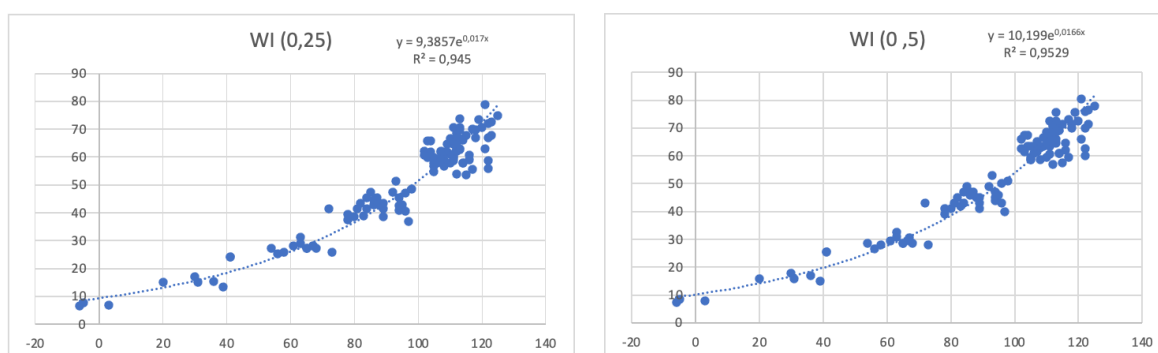
Kot je razvidno iz vstavljenih diagramov in tabele, je najvišja vrednost R^2 za linearno funkcijo pri 1,25. S tem smo ovrgli našo hipotezo, da bi morali za vrednost dvojne vezi vstaviti 0,5, ker so ogljikovi atomi fizično bližje.

Vrednosti R^2 se za dane podatke zdijo relativno nizke, kar je sicer po eni strani razumljivo, saj kemijske lastnosti naravnih spojin težko primerjamo z natančnostjo linearne premice, po drugi strani pa so odstopanja (sploh na začetku regresijske črte pri molekulah z do štiri ogljikovimi atomi) zelo velika. Ker so bila odstopanja veliko večja od pričakovanih, smo želeli raziskati, če lahko morda najdemo krivuljo z večjim prilaganjem. Na koncu smo ugotovili, da se najbolj prilega eksponentna funkcija, zato smo se bolj osredotočili na slednjo.

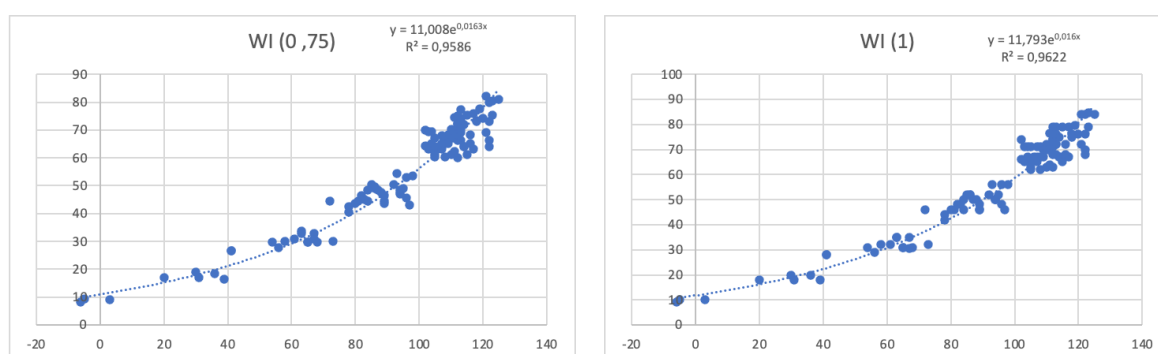
4.2 REZULTATI KRIVULJE EKSPONENTNE REGRESIJE

Tako smo v nadaljevanju v diagrame vrisali tudi krivulje eksponentne regresije. Rezultati so bili veliko boljši, dobili pa smo naslednje diagrame:

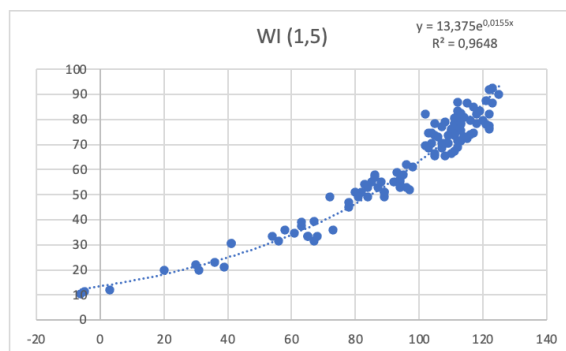
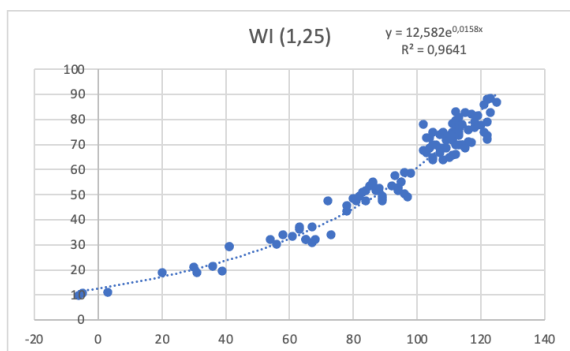
Graf 13: Krivulja eksponentne regresije pri vrednosti dvojne vezi 0,25. Graf 14: Krivulja eksponentne regresije pri vrednosti dvojne vezi 0,5.



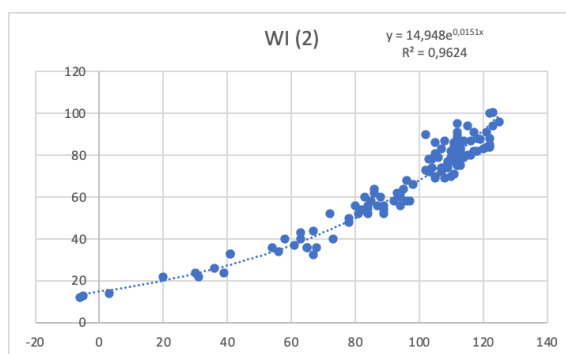
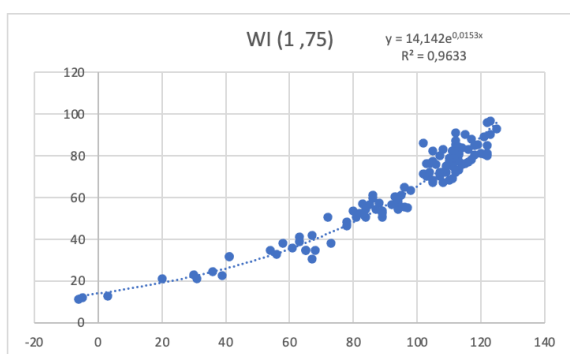
Graf 15: Krivulja eksponentne regresije pri vrednosti dvojne vezi 0,75. Graf 16: Krivulja eksponentne regresije pri vrednosti dvojne vezi 1.



Graf 17: Krivulja eksponentne regresije pri vrednosti dvojne vezi 1,25. Graf 18: Krivulja eksponentne regresije pri vrednosti dvojne vezi 1,5.



Graf 19: Krivulja eksponentne regresije pri vrednosti dvojne vezi 1,75. Graf 20: Krivulja eksponentne regresije pri vrednosti dvojne vezi 2.



Graf 21: Krivulja eksponentne regresije pri vrednosti dvojne vezi 2,25. Graf 22: Krivulja eksponentne regresije pri vrednosti dvojne vezi 2,5.

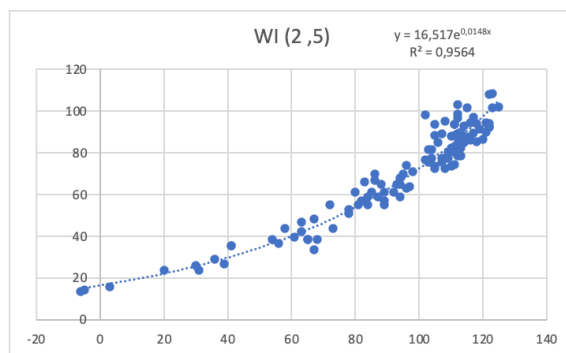
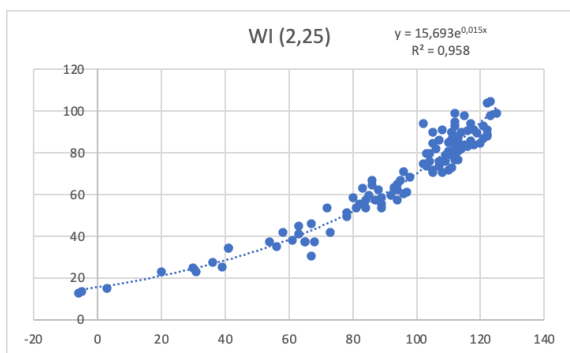


Tabela 3: Tabela rezultatov za eksponentno funkcijo

| VREDNOST DVOJNE VEZI | R^2 ZA EKSPONENTNO FUNKCIJO |
|----------------------|-------------------------------|
| 0,25 | 0,945 |
| 0,5 | 0,9529 |
| 0,75 | 0,9586 |
| 1 | 0,9622 |
| 1,25 | 0,9641 |
| 1,5 | 0,9648 |
| 1,75 | 0,9633 |
| 2 | 0,9624 |
| 2,25 | 0,958 |
| 2,5 | 0,9564 |

Pri eksponentni funkciji so bile že v začetku vrednosti determinacijskega koeficienta opazno bližje številu ena, kar je naš cilj, saj to pomeni popolno funkcijsko zveznost. Čisto vse vrednosti koeficienta so bile višje kot pri regresijski premici, najvišjo vrednost pa smo dobili, ko smo za vrednost dvojne vezi vstavili 1,5. V tem primeru je bila vrednost determinacijskega koeficienta 0,9648, kar pomeni zelo visoko stopnjo zveznosti.

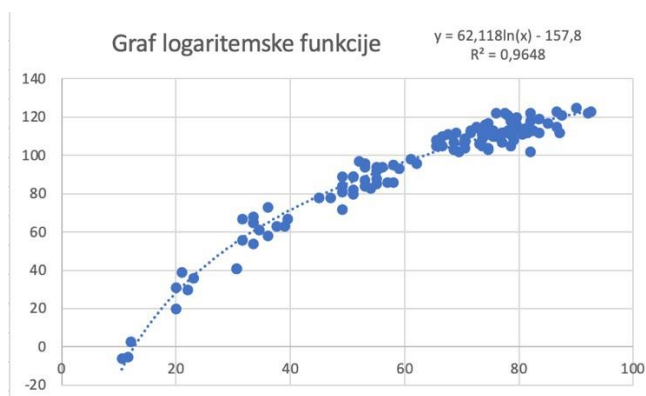
S tem smo ugotovili, da je pri računanju Wienerjevih indeksov alkenov namesto števila ena za dvojno vez najbolj smiselno vstaviti vrednost 1,5.

4.3 LOGARITEMSKA FORMULA IN NADALJEVANJE PROGRAMA

Pri raziskovalnem delu smo tako prišli do zaključka, da je determinacijski koeficient najvišji pri krivulji eksponentne regresije (eksponentna funkcija), pri kateri dvojno vez predstavlja vrednost 1,5. S tem je Wienerjev indeks postal neodvisna spremenljivka in smo vrednost letega postavili na x-os. Tako so se vrednosti na abscisni in ordinatni osi zamenjale, s tem pa smo dobili inverzno funkcijo eksponentne funkcije – to je logaritemska funkcija.

Diagram:

Graf 23: Diagram logaritemske funkcije.



Dobili smo formulo nove regresijske črte, ki se glasi:

$$T_v = 62,118 \ln(W) - 157,8$$

pri čemer predstavlja spremenljivka W vrednost Wienerjevega indeksa alkena (pri vrednosti dvojne vezi 1,5), spremenljivka T_v pa njegovo predvideno vrelišče. Zaradi odstopanj pri realnih temperaturah vrelišč in pa nezveznosti diagrama lahko tudi pri izračunih pride do manjših odstopanj.

Nato smo posodobili tudi sestavo našega računalniškega programa, ki sedaj poleg Wienerjevega indeksa na koncu izračuna tudi predvideno temperaturo vrelišča po formuli $T_v = 62,118 \ln(W) - 157,8$.

```
v = np.log(wiener_index) * 62.118 - 157.8
print("Vrelišče:",v)
```

Slika 26: Dodatek k sestavi programa

Tako zdaj v začetni program vpišemo le SMILES zapis molekule in vrednost 1,5 ter dobimo izpisan celoten obširen zapis analize molekule.

```

(.venv) vanja@LAPTOP-VU:~/Documents/program/program$ python main.py CCC=CC 1.5
[(0, 'C'), (1, 'C'), (2, 'C'), (3, 'C'), (4, 'C')]
[(0, 1, 1), (1, 2, 1), (2, 3, 2), (3, 4, 1)]
Number of C atoms: 5
matrix shape: (5, 5)
[[0.  1.  2.  3.5 4.5]
 [0.  0.  1.  2.5 3.5]
 [0.  0.  0.  1.5 2.5]
 [0.  0.  0.  0.  1. ]
 [0.  0.  0.  0.  0. ]]
Wiener index: 23.0
Vrelisce: 36.97062970508691

```

Slika 27: Dokončen izpis programa

V dodatni vrstici rezultata programa, oziroma zadnji vrstici na sliki 27, program torej izpiše predvideno temperaturo vrelišča. Ker smo vnesli SMILES zapis molekule pent-2-ena, vidimo, da predvidena temperatura vrelišča tega ogljikovodika znaša 36,971°C. V literaturi zasledimo podatek, da pri laboratorijskih eksperimentih temperatura vrelišča pent-2-ena meri 36,733°C, kar pomeni, da sta vrednosti res podobni. Kot predvideno pa je v nekaterih primerih prišlo tudi do rahlih odstopanj ($\pm 3^\circ\text{C}$), saj vrelišča v naravi ne naraščajo popolnoma funkcijsko.

5. RAZPRAVA

HIPOTEZA 1: Podatki o lastnostih molekul so na spletu hitro in enostavno dostopni; molekule so preprosto predstavljljive.

Skozi celotno raziskovalno nalogo smo iskali različne oblike predstavitev molekul. Ugotovili smo, da je na spletu veliko različnih oblik zapisa, ki se osredotočajo na različne lastnosti molekul. Tako je najbolj smiselno, da sami poiščemo zapis, ki najbolj ustreza našim potrebam v raziskovalnem delu. Ker smo se v raziskovalni nalogi osredotočali na razvrstitev atomov in dvojne vezi v molekuli, nam je najbolj ustrezal zapis SMILES (in ne na primer zapis MOL, saj nismo potrebovali xyz koordinat atomov znotraj molekule). Zapis SMILES je bil za preproste molekule večinoma hitro in dobro dostopen podatek.

Tako smo ugotovili, da so za molekule, ki so bolj poznane in širše uporabljene, podatki na spletu veliko lažje dostopni, za bolj razvejane in manj znane molekule z večji alkilnimi skupinami pa so podatki seveda dostopni malo težje.

S tem je naša hipoteza **DELNO POTRJENA**.

HIPOTEZA 2: Če je med dvema ogljikovima atomoma (namesto enojne) dvojna vez, sta si v naravi fizično bližje skupaj, torej mora biti razdalja v matriki sosednosti manj kot 1.

Ugotovili smo, da sama fizična bližina ne vpliva na vrednosti v matriki razdalj, saj nismo dobili najboljših rezultatov, ko smo dvojno vez predstavili kot vrednost 0,5. Kot razdaljo v matriki je namreč najbolj smiselno vstaviti število 1,5, kar pa ni manjše od ena, čeprav so atomi v naravi fizično bližje skupaj.

S tem je naša hipoteza **OVRŽENA**.

HIPOTEZA 3: Zaradi spremenjenega modeliranja alkenov bomo dobili boljše napovedane vrednosti vrelišča iz Wienerjevega indeksa.

Če temperaturo vrelišča računamo po formuli $T_v = 62,118 \ln(W) - 157,8$, so vrednosti, ki jih dobimo, veliko bolj podobne dejanskim vrednostim vrelišč, kot takrat, ko alkene obravnavamo kot alkane. S tem ko dvojno vez ne predstavimo kot število ena (enako kot enojno), namreč upoštevamo njen vpliv na višino temperature vrelišča. S pomočjo našega računalniškega

programa in te formule lahko zdaj na podlagi Wienerjevega indeksa veliko boljše napovemo višino temperature vrelišč alkenov z eno dvojno vezjo.

S tem je naša hipoteza **POTRJENA**.

6. ZAKLJUČEK

Cilj raziskovalne naloge je bil dosežen. Ugotovili smo, katero vrednost je najbolj smiselno vstaviti namesto dvojne vezi pri računanju Wienerjevega indeksa, da bodo dobljeni podatki čim bližji realnim vrednostim. Ugotovili smo, da moramo pri računanju tega indeksa vstaviti vrednost 1,5, saj je takrat determinacijski koeficient pri eksponentni funkciji najvišji, kar pomeni, da je med podatki najmanjše odstopanje.

S tem smo dobili tudi formulo, s katero si lahko pomagamo pri predvidevanju temperatur vrelišč alkenov z eno dvojno vezjo. Formula se glasi $T_v = 62,118 \ln(W) - 157,8$. V formuli W predstavlja vrednost Wienerjevega indeksa, T_v pa je predvideno vrelišče (seveda obstaja možnost manjšega odstopanja).

Raziskovalno nalogo bi lahko razširili in ugotovili, ali ugotovitve te raziskovalne naloge veljajo tudi za alkene z dvema dvojnima vezema oziroma za alkene z več kot osmimi ogljikovimi atomi. Med raziskovanjem se je porajalo tudi vprašanje, kako je najboljšje računati Wienerjev indeks pri alkinih oziroma katero vrednost bi bilo najbolj smiselno vstaviti namesto trojne vezi.

Pomemben rezultat te raziskovalne naloge je tudi računalniški program, ki je na začetku služil le za izračun Wienerjevih indeksov posameznih alkenov za različne vrednosti, vstavljene namesto dvojne vezi, na koncu pa smo ga dopolnili. Sedaj program zgolj na podlagi SMILES zapisa molekule s pomočjo Wienerjevega indeksa sam izračuna tudi predvideno temperaturo vrelišča.

7. DRUŽBENA ODGOVORNOST

Razvoj novih učinkovin je dolgotrajen in drag proces, saj celotni postopek od ideje do končnega izdelka običajno zahteva leta raziskav in velik finančni zalogaj. Z uporabo novih matematičnih pristopov in modernih računalnikov skušamo skrajšati in poceniti posamezne faze razvoja. Razvijajo se nova matematična orodja za uporabo na področju razvoja novih zdravil.

Z algoritmi, ki temeljijo na teoriji grafov in metodah simulacije molekulske dinamike, preučujemo tarčne biološke molekule in pridobivamo pomembne podatke za optimiziranje zgodnjih stopenj razvoja novih zdravil.

Metode računalniške simulacije so se v zadnjih desetletjih zelo razširile pri raziskavah v molekularni kemiji in v strukturni biologiji.

Tolikšen razvoj metod je omogočil zlasti napredek pri eksperimentalnih tehnikah, ki terjajo vse podrobnejši vpogled v potek osnovnih fizikalnih in kemijskih procesov.

Tudi v boju proti covidu-19 pomagajo superračunalniki, ki lahko v nekaj dneh preverijo 8.000 spojin in odkrijejo 77 malih molekul (zdravil ali naravnih spojin), ki bi lahko negativno delovale na novi koronavirus.

8. REFERENCE

- Attenborough, M. (2003). *Mathematics for Electrical Engineering and Computing*.
- Begam, B. F., & Satheesh Kumar, J. (2012). A study on Chemoinformatics and its Applications on Modern Drug Discovery. *Procedia Engineering*.
- Belford, R. (6. junij 2019). *Chem.libretexts*. Pridobljeno iz <https://chem.libretexts.org/@go/page/83691>
- Botez, A. V., & Putz, M. V. (2014). New Frontiers in Chemistry. *Chemical modeling using graphs: from adjacency matrix to Randić coding of DNA*, str. 21-38.
- Gastgeiger, J. (25. september 2003). Chemoinformatics.
- Guha, R., & Theisen, K. (8. december 2020). ASC. Pridobljeno iz <https://www.acs.org/content/acs/en/careers/college-to-career/chemistrycareers/cheminformatics.html>
- Gutman, I. (2013). Degree-Based Topological Indices.
- Hosoya, H. (1971). Topological index. A newly proposed quantity characterizing the topological nature of structural isomers of saturated hydrocarbons. *Bull. Chem. Soc. Jpn.*
- Hribar-Lee, B., & Podlipnik, Č. (2019). *Molekulska modeliranje*. Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo.
- Karantha, M. P., Sudhakara, G., Hukoodu Subramanya, S., & Madhusudanan, V. (2013). Matrix Product of Graphs.
- Kraner Šumenjak, T. (2011). *Statistika*. Pridobljeno iz <http://www.fkbv.um.si/images/stories/matematika/9pred-stat.pdf>
- Leach, A. R., & Gillet, V. J. (2007). *An Introduction To Chemoinformatics*. Springer, Dordrecht.
- LibreTexts*. (12. marec 2020). Pridobljeno iz <https://chem.libretexts.org/@go/page/154856>
- Ma, J., Shi, Y., & Yue, J. (2014). The Wiener Polarity Index of Graph Products.
- Miličević, A., Nikolić, S., Plavsic, D., & Trinajstić, N. (2003). On the Hosoya Z Index of General Graphs. *Internet Electronic Journal of Molecular Design*.
- Mohar, B., & Pisanski, T. (1987). *How to compute the wiener index of a graph*. Ljubljana.
- Smrdu, A. (2010). *Kemija, Snov in spremembe 3*. Ljubljana: Založništvo Jutro.
- West, D. B. (2001). *Introduction to Graph Theory*. Pearson Education, Inc.
- Wiener, H. (1. januar 1947). Structural Determination of Paraffin Boiling Points.
- Wishart, D. (2007). Introduction to chemoinformatics. *Curr Protoc Bioinformatics*.