

ХИМИЧЕСКАЯ ТЕРМОДИНАМИКА
И ТЕРМОХИМИЯ

УДК 541:544.43

ИНФОРМАЦИОННАЯ ЭНТРОПИЯ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ И НЕЗАВИСИМЫХ
ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ

© 2023 г. А. Д. Зими́на^а, И. С. Шепелевич^а, Д. Ш. Сабиров^{а,*}

^а 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 фи-

зико-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]:

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

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

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

Кооперативная энтропия рассчитывается по формуле:

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

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

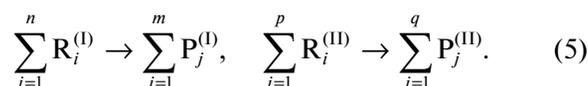
изменение информационной энтропии Δh_R есть разница между значениями h_{ME} для ансамблей продуктов и реагентов или с учетом уравнения:

$$\Delta h_R = \sum_{\text{prod}} \omega_i h_i - \sum_{\text{react}} \omega_j h_j + H_\Omega^{\text{prod}} - H_\Omega^{\text{react}}. \quad (4)$$

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:



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:

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

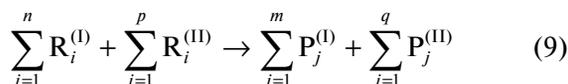
В выражениях (6) (I) и (II) указывают на то, к какому из ансамблей относятся доли ω . Например:

$$\omega_j^{(I)}(R_i^{(I)}) = \frac{N(R_i^{(I)})}{\sum_{i=1}^n N(R_i^{(I)})} \quad (7)$$

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

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n N(R_i^{(I)}) &= \sum_{j=1}^m N(P_j^{(I)}), \\ \sum_{i=1}^p N(R_i^{(II)}) &= \sum_{j=1}^q N(P_j^{(II)}). \end{aligned} \quad (8)$$

Суммарный процесс, включающий независимые реакции I и II:



характеризуется следующим изменением информационной энтропии:

$$\Delta h_R = \sum_{j=1}^m \omega_j h(P_j^{(I)}) + \sum_{j=1}^q \omega_j h(P_j^{(II)}) - \sum_{i=1}^n \omega_i h(R_i^{(I)}) - \sum_{i=1}^p \omega_i h(R_i^{(II)}) + H_{\Omega}^P - H_{\Omega}^R. \quad (10)$$

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

$$\omega_i(R_i^{(I)}) = \frac{N(R_i^{(I)})}{\sum_{i=1}^n N(R_i^{(I)}) + \sum_{i=1}^p N(R_i^{(II)})} = \frac{N(R_i^{(I)})}{\sum_{j=1}^m N(P_j^{(I)}) + \sum_{j=1}^q N(P_j^{(II)})}. \quad (11)$$

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

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

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

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

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

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

Обозначим долю атомов ансамбля участников I-й реакции в обобщенном ансамбле (аналогично — для II-й реакции) как ω_I :

$$\omega_I = \frac{\sum_{i=1}^n N(R_i^{(I)})}{\sum_{i=1}^n N(R_i^{(I)}) + \sum_{i=1}^p N(R_i^{(II)})} = \frac{\sum_{j=1}^m N(P_j^{(I)})}{\sum_{i=1}^m N(P_i^{(I)}) + \sum_{i=1}^q N(P_i^{(II)})}. \quad (16)$$

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

$$\omega_j = \omega_I \omega_j^{(I)}. \quad (17)$$

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 $H_{\Omega}^{P(I)}$ и $H_{\Omega}^{P(II)}$ из уравнений (6):

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

Аналогично имеем:

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

Из равенств (8) следует, что

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

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

$$\Delta h_R = \omega_I \sum_{j=1}^m \omega_j^{(I)} h(P_j^{(I)}) + \omega_{II} \sum_{j=1}^q \omega_j^{(II)} h(P_j^{(II)}) - \omega_I \sum_{i=1}^n \omega_i^{(I)} h(R_i^{(I)}) - \omega_{II} \sum_{i=1}^p \omega_i^{(II)} h(R_i^{(II)}) + H_{\Omega}^{P(I)+P(II)} + \omega_I H_{\Omega}^{P(I)} + \omega_{II} H_{\Omega}^{P(II)} - H_{\Omega}^{R(I)+R(II)} - \omega_I H_{\Omega}^{R(I)} - \omega_{II} H_{\Omega}^{R(II)}. \quad (21)$$

Сгруппировав слагаемые, с учетом равенства (20) получим:

$$\Delta h_R = \omega_I \left[\sum_{j=1}^m \omega_j^{(I)} h(P_j^{(I)}) - \omega_I \sum_{i=1}^n \omega_i^{(I)} h(R_i^{(I)}) + H_{\Omega}^{P(I)} - H_{\Omega}^{R(I)} \right] + \omega_{II} \left[\sum_{j=1}^q \omega_j^{(II)} h(P_j^{(II)}) - \omega_{II} \sum_{i=1}^p \omega_i^{(II)} h(R_i^{(II)}) + H_{\Omega}^{P(II)} - H_{\Omega}^{R(II)} \right]. \quad (22)$$

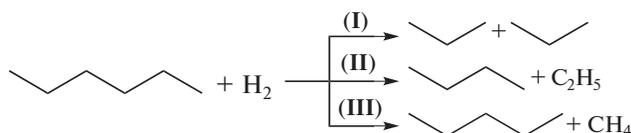


Рис. 1. Параллельные химические реакции *n*-гексана с водородом.

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 ω_i — доли атомов, приходящиеся на участников *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)	$H_{\Omega}^{\text{react}}$	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
$2C_6H_{14} + 2H_2 \rightarrow C_2H_6 + 2C_3H_8 + C_4H_{10}$ ($\Sigma 1$)	1.439	1.973	-0.113
$3C_6H_{14} + 3H_2 \rightarrow CH_4 + C_2H_6 + 2C_3H_8 + C_4H_{10} + C_5H_{12}$ ($\Sigma 2$)	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 *n*-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 $\Sigma 1 = (I) + (II)$ и $\Sigma 2 = (I) + (II) + (III)$ (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 $\Delta S_{R(\Sigma 2)} = \Delta S_{R(I)} + \Delta S_{R(II)} + \Delta S_{R(III)}$.

Информационно-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., Зефирова 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. Mineral.* 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., Thuriéau 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. Тухбатулина 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.