

УДК 541:544.43

*Статья посвящается юбилею члена-корреспондента РАН Альберта Львовича Лapidуса***ИНФОРМАЦИОННАЯ ЭНТРОПИЯ КАТАЛИТИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ**© 2023 г. А. Д. Зимина¹, А. А. Тухбатуллина¹, Д. Ш. Сабилов^{1,*}

Поступило 21.05.2023 г.

После доработки 14.07.2023 г.

Принято к публикации 20.07.2023 г.

В качестве структурных дескрипторов широко используются индексы на основе информационной энтропии. Изменение информационной энтропии в химической реакции рассчитывается как разность значений, соответствующих ансамблю продуктов и ансамблю реагентов. Для обобщенной схемы каталитической реакции выведены аналитические выражения, связывающие ее информационную энтропию с параметрами отдельных стадий и соответствующим суммарным уравнением. Установлено, что сумма параметров отдельных стадий пропорциональна изменению информационной энтропии в формальной некаталитической реакции, а коэффициентом пропорциональности является доля атомов, приходящихся на реагирующие (образующиеся) молекулы в ансамбле исходных веществ (или продуктов).

Ключевые слова: информационная энтропия, кооперативная энтропия, молекулярный ансамбль, химическая реакция, катализ, элементарные стадии

DOI: 10.31857/S2686953523600253, **EDN:** RLWGIB

Топологические инварианты молекулярных графов – распространенные структурные дескрипторы для количественного описания сложности строения химических соединений [1, 2], используемые при решении различных задач физической химии, например, для поиска корреляций “структура–свойство”/“структура–активность” [3, 4], классификации молекул [5–9] и минералов [10], изучения сложности кристаллических тел [11–14]. Одним из часто используемых структурных дескрипторов является информационная энтропия (h), вычисляемая как

$$h = -\sum_i p_i \log p_i \quad (1)$$

где p_i – статистические веса атомов разных типов, которые определяются на основе анализа молекулярного графа и разбиения множества его атомов-вершин на неэквивалентные подмножества [1, 2, 5]. В таком подходе молекулы, содержащие большие группы химически эквивалентных ато-

мов (например, высокосимметричные молекулы), получают меньшие значения h и наоборот [15–17].

В последнее время в дискретной математической химии становится актуальным применение структурных дескрипторов не только к отдельным молекулам, но и химическим реакциям [18–20], а также аспекты цифрового описания последних, связанные с этой проблемой [21]. Отметим, что возможности применения информационной энтропии для описания химических процессов были показаны в работах Н. Рашевского [22] и Дж. Карремана [23] еще в середине 1950-х гг. Детально этот вопрос изучался в работах советских ученых. Н.И. Кобозев создал одну из термодинамических моделей процесса изменения информационной энтропии [24] и использовал информационно-теоретический аппарат для изучения каталитических реакций, в которых информационная энтропия применялась для оценки изменений химической сложности катализатора, связанных с образованием дефектов и процессами сорбции [25, 26]. Ю.А. Жданов использовал информационную энтропию для изучения простейших реакций органических соединений [5].

Поскольку химическая реакция может быть представлена как превращение одного молекулярного ансамбля (реагентов) в другой (продуктов) [27], нами изучалась информационная энтропия коллективов молекул и была получена

¹Институт нефтехимии и катализа,
Уфимский федеральный исследовательский центр
Российской академии наук, 450075, Уфа,
Республика Башкортостан, Россия

*E-mail: diozno@mail.ru

формула, устанавливающая связь между параметрами ансамбля (h_{ME}) и составляющих его молекул (h_i) [28]:

$$h_{ME} = \sum_{i=1}^n \omega_i h_i + H_{\Omega} \quad (2)$$

где $\omega_i = \frac{N_i}{\sum_{i=1}^n N_i}$ – доля атомов n -молекулярного ансамбля, приходящаяся на i -ю молекулу, а H_{Ω} – кооперативная энтропия, представляющая собой эмерджентный параметр, отражающий факт объединения молекул в ансамбль. Кооперативная энтропия рассчитывается по формуле:

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

и зависит только от размера молекул, входящих в ансамбль. Дополнительное слагаемое H_{Ω} позволяет избегать контринтуитивных оценок сложности химических систем [28, 29]. Примечательно, что аналогичное слагаемое появляется в теории квантовой информации при описании энтропии фон Неймана связанных систем [30].

В развиваемом подходе изменение информационной энтропии Δh_R в химической реакции есть разница между значениями h_{ME} ансамблей продуктов и реагентов или, с учетом формулы (2),

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

Последнее выражение использовалось нами для анализа химических реакций органических соединений [28, 29, 31] и фуллеренов [9, 32]. Оно имеет более сложный вид, по сравнению с аналогичными выражениями для термодинамических параметров реакций [31], а значит и функциональная связь между параметрами отдельных стадий химического процесса и суммарной реакцией тоже может отличаться. Ранее этот вопрос изучался на отдельных простейших примерах (например, [33]), однако для современной цифровой химии представляет интерес анализ сложных химических превращений.

В настоящей работе получена аналитическая зависимость, связывающая информационную энтропию каталитической реакции, ее некаталитического варианта и элементарных стадий.

ВЫВОД АНАЛИТИЧЕСКОЙ ЗАВИСИМОСТИ

Рассмотрим общую схему каталитического процесса:



которая включает взаимодействие молекул А и В с катализатором К (стадии (I) и (II)), превращение образовавшейся структуры в комплекс катализатора и продукта С (III) и распад этого комплекса с высвобождением катализатора (IV). Для каждой элементарной стадии в соответствии с определением информационной энтропии химической реакции (уравнение (4)) имеем:

$$\Delta h_{R(I)} = h_{AK} - \omega_A^{AK} h_A - \omega_K^{AK} h_K - H_{\Omega}^{A+K}$$

$$\Delta h_{R(II)} = h_{AKB} - \omega_{AK}^{AKB} h_{AK} - \omega_B^{AKB} h_B - H_{\Omega}^{AK+B} \quad (5)$$

$$\Delta h_{R(III)} = h_{CK} - h_{AKB}$$

$$\Delta h_{R(IV)} = \omega_C^{CK} h_C + \omega_K^{CK} h_K - h_{CK} + H_{\Omega}^{C+K}$$

Здесь и далее доли атомов, приходящихся на молекулу X в молекулярном ансамбле Y, обозначены как ω_X^Y . Суммарное химическое уравнение, соответствующее схеме, имеет вид:



и характеризуется следующим изменением информационной энтропии:

$$\Delta h_{R(\Sigma)} = h_C - \omega_A^{AB} h_A - \omega_B^{AB} h_B - H_{\Omega}^{A+B} \quad (6)$$

Рассмотрим также суммарное уравнение каталитической схемы, в котором катализатор оставлен в обеих частях:



Ему соответствует изменение информационной энтропии:

$$\Delta h_{R(\text{cat})} = \omega_C^{CK} h_C - \omega_A^{ABK} h_A - \omega_B^{ABK} h_B + H_{\Omega}^{C+K} - H_{\Omega}^{A+B+K} \quad (7)$$

Обозначим через $\omega_S = \frac{N_A + N_B}{N_A + N_B + N_K} = \frac{N_C}{N_A + N_B + N_K}$ долю атомов, приходящуюся на взаимодействующие молекулы (“субстрат”) в их ансамбле с катализатором. Легко показать, что:

$$H_{\Omega}^{A+B+K} = H_{\Omega}^{AB+K} + \omega_S H_{\Omega}^{A+B} \quad (8)$$

Из равенства $N_C = N_A + N_B$ следует, что $H_{\Omega}^{C+K} = H_{\Omega}^{AB+K}$. С учетом этого, сравнив выражения (6) и (7), получим:

$$\Delta h_{R(\text{cat})} = \omega_S \Delta h_{R(\Sigma)} \quad (9)$$

Из последнего соотношения видно, что при описании сложной химической реакции важную роль играет размер (доля) взаимодействующих молекул. Поэтому прежде чем связать информа-

ционную энтропию суммарного процесса $\Delta h_{R(\Sigma)}$ со значениями отдельных стадий, отметим, как изменяется размер молекулярного ансамбля в элементарных процессах схемы. Количество атомов в реагентах и продуктах стадий (II)–(IV) одинаково и максимально: $\omega^{(II)} = \omega^{(III)} = \omega^{(IV)} = 1$. Только для реакции (I) имеем

$$\omega^{(I)} = \frac{N_A + N_K}{N_A + N_B + N_K}.$$

Рассмотрим следующую сумму выражений (5) для информационно-энтропийных параметров отдельных стадий:

$$\begin{aligned} \sum_i \omega^{(i)} \Delta h_{R(i)} = & \omega^{(I)} h_{AK} - \omega^{(I)} \omega_A^{AK} h_A - \omega^{(I)} \omega_K^{AK} h_K - \\ & - \omega^{(I)} H_{\Omega}^{A+K} + h_{AKB} - \omega_{AK}^{AKB} h_{AK} - \omega_B^{AKB} h_B - H_{\Omega}^{AK+B} + \\ & + h_{CK} - h_{AKB} + \omega_C^{CK} h_C + \omega_K^{CK} h_K - h_{CK} + H_{\Omega}^{C+K} \end{aligned} \quad (10)$$

Приведем в последнем выражении все доли к виду, соответствующему суммарному процессу (VI), т.е. учтем, что $\omega^{(I)} = \omega_{AK}^{AKB}$, $\omega^{(I)} \omega_A^{AK} = \omega_A$, $\omega^{(I)} \omega_K^{AK} = \omega_K$, $\omega_B^{AKB} = \omega_B$, $\omega_C^{CK} = \omega_C$ и упростим:

$$\begin{aligned} \sum_i \omega^{(i)} \Delta h_{R(i)} = & \omega_C h_C - \omega_A h_A - \omega_B h_B + \\ & + H_{\Omega}^{C+K} - H_{\Omega}^{AK+B} - \omega^{(I)} H_{\Omega}^{A+K} \end{aligned} \quad (11)$$

Значения кооперативной информационной энтропии ансамблей (A + B + K), (A + K) и (AB + K) связаны отношением:

$$H_{\Omega}^{A+B+K} = H_{\Omega}^{AK+B} + \omega^{(I)} H_{\Omega}^{A+K} \quad (12)$$

Его подстановка в выражение (11) дает уравнение (7), из чего следует:

$$\Delta h_{R(\text{cat})} = \sum_i \omega^{(i)} \Delta h_{R(i)} \quad (13)$$

Объединив (9) и (13), получим аналитическое выражение, связывающее информационную энтропию отдельных стадий со значением, соответствующим суммарному процессу (V):

$$\Delta h_{R(\Sigma)} = \frac{1}{\omega_S} \sum_i \omega^{(i)} \Delta h_{R(i)} \quad (14)$$

Полученные аналитические выражения (9), (13) и (14) характеризуют связь между изменением информационной энтропии в каталитической реакции $\Delta h_{R(\text{cat})}$, ее элементарных стадиях $\Delta h_{R(i)}$ и некаталитическом процессе $\Delta h_{R(\Sigma)}$.

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Согласно полученному уравнению (9), величины информационной энтропии каталитического и некаталитического процессов пропорци-

ональны. Это является отличием от термодинамических параметров реакции (например, в силу закона Гесса $\Delta S_{R(\text{cat})} = \Delta S_{R(\Sigma)}$ для термодинамической энтропии рассматриваемой схемы превращения). В отличие от последних, информационно-теоретические параметры учитывают размер субстрата (или катализатора, поскольку $\omega_S + \omega_K = 1$). Такая неаддитивность в случае информационной энтропии является следствием неаддитивности информационной энтропии ансамблей продуктов и реагентов (уравнение (2)). Из выражения (9) следует, что $\Delta h_{R(\text{cat})} \rightarrow \Delta h_{R(\Sigma)}$ при $\omega_S \rightarrow 1$ и $\Delta h_{R(\text{cat})} \rightarrow 0$ при $\omega_S \rightarrow 0$, т.е. изменения структурной сложности в каталитическом процессе не могут быть глубже изменений в некаталитическом брутто-процессе.

Другим ключевым отличием в расчете информационно-энтропийных и термодинамических параметров отдельных стадий является использование долей атомов, приходящихся на молекулу участника химической реакции в молекулярном ансамбле (в первом случае), вместо стехиометрических коэффициентов (во втором случае). Это не влияет на вычисление информационной энтропии суммарного процесса через параметры стадий, если размер ансамбля одинаков для всех стадий. Однако если в стадийный процесс вовлекаются новые соединения (или образующиеся вещества исключаются из процесса), это приводит к аналитической зависимости (13).

Ранее предполагалось, что при анализе химических реакций математические операции со структурными дескрипторами аналогичны операциям с термодинамическими параметрами (например, в первых работах [5, 23]). В наших предыдущих исследованиях было показано, что это не так, а в настоящей работе – установлены аналитические выражения для вычисления информационной энтропии многостадийной каталитической реакции.

Продемонстрируем выполнение соотношения (13) на примере известной реакции эпексидирования этилена, катализируемой кластерами серебра Ag_{13} . Строение ключевых интермедиатов этого процесса дано в соответствии с данными предыдущих работ [34, 35] (рис. 1); разбиение структур на подмножества неэквивалентных атомов и соответствующие значения информационной энтропии даны в табл. 1. В кластере Ag_{13} двенадцать атомов образуют наноразмерный икосаэдр, внутри которого находится тринадцатый атом серебра (структура $\text{Ag}@\text{Ag}_{12}$, рис. 1). Вычисление информационной энтропии проводили по уравнению (1) согласно [15, 28, 29]; в расчетах использовались логарифмы по основанию 2, что позволяет выразить информационно-энтропий-

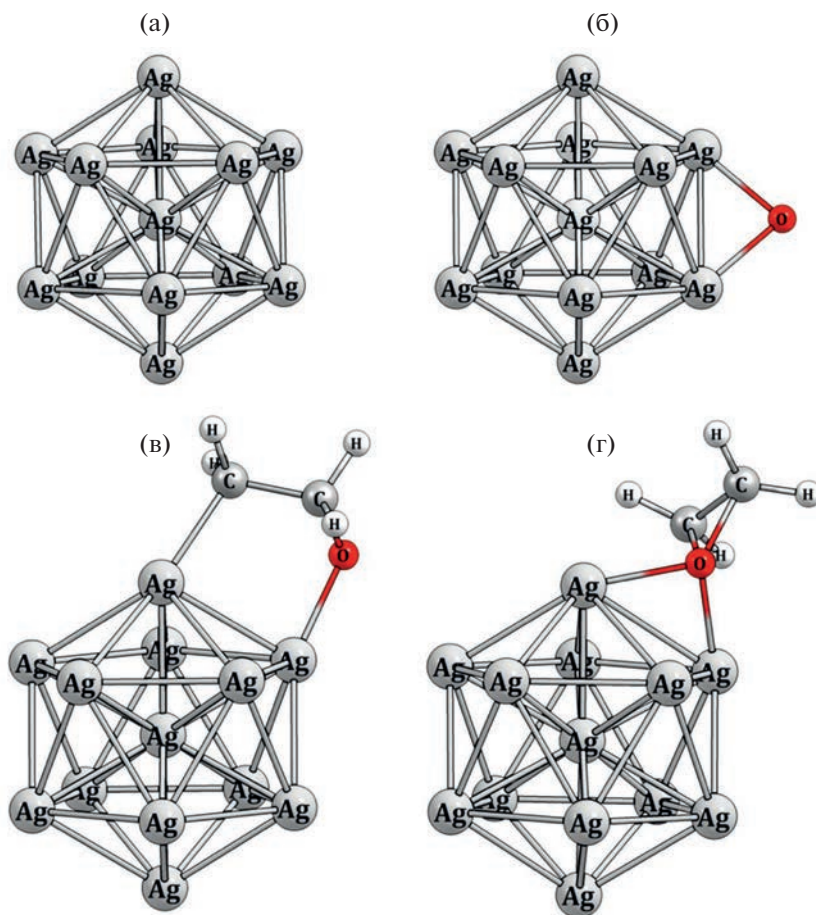


Рис. 1. Строение катализатора Ag_{13} (а) и ключевых интермедиатов (б–г) каталитического эпоксирирования этилена.

ные параметры молекул, ансамблей и реакций в бит/атом [2, 5].

Изменение информационной энтропии в элементарных стадиях каталитического эпоксирирования

Таблица 1. Информационная энтропия участников реакции каталитического эпоксирирования этилена

Соединение ^а	Разбиение по атомным типам ^б	Информационная энтропия h (бит/атом) ^в
C_2H_4	$1 \times 2 + 1 \times 4$	0.918
Ag_{13} (а)	$1 \times 1 + 1 \times 12$	0.391
Ag_{13}O (б)	$2 \times 1 + 4 \times 2 + 1 \times 4$	2.664
$\text{C}_2\text{H}_4\text{O}$	$1 \times 2 + 1 \times 4 + 1 \times 1$	1.379
$\text{C}_2\text{H}_4\text{Ag}_{13}\text{O}$ (в)	20×1	4.322
$\text{C}_2\text{H}_4\text{OAg}_{13}$ (г)	$2 \times 1 + 5 \times 2 + 2 \times 4$	3.022

^а В скобках приведено обозначение структуры на рис. 1.

^б Формула разбиения приводится в соответствии с общепринятым обозначением: [количество атомных типов] \times [количество атомов в подмножестве]. ^в Расчет по формуле (1).

вания этилена (I)–(IV), а также брутто-процессах (V) и (VI), рассчитывалось по уравнению (4) (табл. 2). В качестве дополнительного характеристического параметра в табл. 2 также приводятся значения кооперативной энтропии ансамблей продуктов и реагентов ($H_{\Omega}^{\text{prod}} < H_{\Omega}^{\text{react}}$ для реакций, протекающих с уменьшением числа частиц; $H_{\Omega} = 0$ – для мономолекулярных ансамблей). Стадии, приводящие к более симметричным продуктам, характеризуются $\Delta h_{\text{R}} < 0$ и наоборот. Значения Δh_{R} для реакций (I)–(IV), $\Delta h_{\text{R}(\Sigma)}$ (реакция (V)) и $\Delta h_{\text{R}(\text{cat})}$ (реакция (VI)) удовлетворяют соотношениям (9), (13), (14).

ВЫВОДЫ

Впервые выведены аналитические выражения, связывающие изменение информационно-энтропийных параметров каталитической реакции, ее элементарных стадий и соответствующего некаталитического процесса. Корректность полученных выражений продемонстрирована на примере реакции каталитического эпоксири-

Таблица 2. Информационно-энтропийные параметры элементарных стадий реакции каталитического эпокси-дирования этилена (бит/атом)

Уравнение реакции (стадия)	$H_{\Omega}^{\text{react}}$	H_{Ω}^{prod}	Δh_R^a
$\text{Ag}_{13} + \text{O} \rightarrow \text{Ag}_{13}\text{O}$ (I)	0.371	0.000	1.930
$\text{Ag}_{13}\text{O} + \text{C}_2\text{H}_4 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_4\text{Ag}_{13}\text{O}$ (II)	0.881	0.000	1.300
$\text{C}_2\text{H}_4\text{Ag}_{13}\text{O} \rightarrow \text{C}_2\text{H}_4\text{OAg}_{13}$ (III)	0.000	0.000	-1.300
$\text{C}_2\text{H}_4\text{OAg}_{13} \rightarrow \text{C}_2\text{H}_4\text{O} + \text{Ag}_{13}$ (IV)	0.000	0.934	-1.351
$\text{C}_2\text{H}_4 + \text{O} \rightarrow \text{C}_2\text{H}_4\text{O}$ (V)	0.592	0.000	0.000
$\text{C}_2\text{H}_4 + \text{Ag}_{13} + \text{O} \rightarrow \text{C}_2\text{H}_4\text{O} + \text{Ag}_{13}$ (VI)	1.141	0.934	0.000

^a Расчет по уравнению (4).

вания этилена. В дальнейшем информационно-энтропийные параметры планируется использовать для изучения многостадийных схем синтеза органических соединений и каталитической конверсии углеводородного сырья.

ИСТОЧНИК ФИНАНСИРОВАНИЯ

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 22-13-20095 “Цифровая органическая химия – новая методология алгоритмизированной оценки химических реакций на основе информационно-энтропийных индексов”).

СОБЛЮДЕНИЕ ЭТИЧЕСКИХ СТАНДАРТОВ

В данной работе исследования на человеке или животных не проводились.

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Автор данной работы заявляет об отсутствии конфликта интересов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Станкевич М.И., Станкевич И.В., Зефирова Н.С. // Усп. хим. 1988. Т. 57. С. 191–208. <https://doi.org/10.1070/RC1988v057n03ABEN003344>
2. Sabirov D.S., Shepelevich I.S. // Entropy. 2021. V. 23. P. 1240. <https://doi.org/10.3390/e23101240>
3. Barigye S.J., Marrero-Ponce Y., Pérez-Giménez F., Bonchev D. // Mol. Divers. 2014. V. 18. P. 673. <https://doi.org/10.1007/s11030-014-9517-7>
4. Basak S.C., Harriss D.K., Magnuson V.R. // J. Pharm. Sci. 1984. V. 73. P. 429. <https://doi.org/10.1002/jps.2600730403>
5. Жданов Ю.А. Энтропия информации в органической химии. Ростов-на-Дону: Изд-во РГУ, 1979. 56 с.
6. Sabirov D., Koledina K. // EPJ Web Conf. 2020. V. 244. P. 01016. <https://doi.org/10.1051/epjconf/202024401016>
7. Castellano G., Torrens F. // Phytochemistry. 2015. V. 116. P. 305. <https://doi.org/10.1016/j.phytochem.2015.05.008>
8. Sabirov D.Sh., Ori O., László I. // Fullerene Nanotube Carbon Nanostruct. 2018. V. 26. P. 100. <https://doi.org/10.1080/1536383X.2017.1405389>
9. Sabirov D.Sh., Tukhbatullina A.A., Shepelevich I.S. // Symmetry. 2022. V. 14. P. 1800. <https://doi.org/10.3390/sym14091800>
10. Krivovichev S.V. // Mineral. Mag. 2013. V. 77. P. 275. <https://doi.org/10.1180/minmag.2013.077.3.05>
11. Аксенов С.М., Ямнова Н.А., Боровикова Е.Ю., Стефанович С.Ю., Волков А.С., Дейнеко Д.В., Димитрова О.В., Гурбанова О.А., Хиксон А.Е., Кривовичев С.В. // Журн. структ. хим. 2020. Т. 61. № 11. С. 1856. https://doi.org/10.26902/JSC_id63255
12. Banaru D.A., Hornfeck W., Aksekov S.M., Banaru A.M. // CrystEngComm. 2023. V. 25. P. 2144. <https://doi.org/10.1039/D2CE01542K>
13. Banaru A.M., Aksekov S.M., Krivovichev S.V. // Symmetry. 2021. V. 13. P. 1399. <https://doi.org/10.3390/sym13081399>
14. Sabirov D.S., Ori O., Tukhbatullina A.A., Shepelevich I.S. // Symmetry. 2021. V. 13. P. 1899. <https://doi.org/10.3390/sym13101899>
15. Sabirov D.Sh. // Comput. Theor. Chem. 2016. V. 1097. P. 83. <https://doi.org/10.1016/j.comptc.2016.10.014>
16. Bonchev D.G. // Bulgar. Chem. Commun. 1995. V. 28. P. 567.
17. Nagaraj N., Balasubramanian K. // Eur. Phys. J. Special Topics. 2017. V. 226. P. 3251. <https://doi.org/10.1140/epjst/e2016-60347-2>
18. Basak S.C. Chemoinformatics and bioinformatics by discrete mathematics and numbers: an adventure from small data to the realm of emerging big data. In: Big data analytics in chemoinformatics and bioinformatics (With applications to computer-aided drug design, cancer biology, emerging pathogens and computational toxicology). Basak S.C., Vračko M. (Eds.). Elsevier, 2023. P. 3–35.
19. Bertz S.H. // New J. Chem. 2003. V. 27. P. 860. <https://doi.org/10.1039/B210843G>

20. *Dehmer M., Mowshowitz A.* // *Inf. Sci.* 2011. V. 181. P. 57.
<https://doi.org/10.1016/j.ins.2010.08.041>
21. *Смоленский Е.А., Чуваева И.В., Ланидус А.Л.* // Докл. АН. 2011. Т. 437. № 5. С. 651.
<https://doi.org/10.1134/S0012500811040100>
22. *Rashevsky N.* // *Bull. Math. Biophys.* 1955. V. 17. P. 229.
<https://doi.org/10.1007/BF02477860>
23. *Karreman G.* // *Bull. Math. Biol.* 1955. V. 17. P. 279.
<https://doi.org/10.1007/BF02477754>
24. *Кобозев Н.И.* // Журн. физ. химии. 1966. Т. 40. С. 281.
25. *Кобозев Н.И., Страхов Б.В., Рубашов А.М.* // Журн. физ. химии. 1971. Т. 45. С. 86.
26. *Кобозев Н.И., Страхов Б.В., Рубашов А.М.* // Журн. физ. химии. 1971. Т. 45. С. 375.
27. *Ugi I., Gillespie P.* // *Angew. Chem.* 1971. V. 10. P. 914.
<https://doi.org/10.1002/anie.197109141>
28. *Sabirov D.Sh.* // *Comput. Theor. Chem.* 2020. V. 1187. P. 112933.
<https://doi.org/10.1016/j.comptc.2020.112933>
29. *Sabirov D.S.* // *Comput. Theor. Chem.* 2018. V. 1123. P. 169.
<https://doi.org/10.1016/j.comptc.2017.11.022>
30. *Нильсен М., Чанг И.* *Квантовые вычисления и квантовая информация.* Пер. с англ. М.: Мир, 2013. 822 с. (пер. с англ.: *Nielsen M.A., Chuang I.L.* *Quantum Computation and Quantum Information.* Cambridge University Press, 2001).
31. *Sabirov D.S., Tukhbatullina A.A., Shepelevich I.S.* // *J. Mol. Graph. Model.* 2022. V. 110. P. 108052.
<https://doi.org/10.1016/j.jmgm.2021.108052>
32. *Sabirov D.Sh., Terentyev O.A., Sokolov V.I.* // *RSC Adv.* 2016. V. 6. P. 72230.
<https://doi.org/10.1039/C6RA12228K>
33. *Тухбатуллина А.А., Шепелевич И.С., Сабиров Д.Ш.* // Вестн. Башкирск. ун-та. 2022. Т. 27. № 2. С. 349.
<https://doi.org/10.33184/bulletin-bsu-2022.2.16>
34. *Özbek M.O., van Santen R.A.* // *Catal. Lett.* 2013. V. 143. P. 131.
<https://doi.org/10.1007/s10562-012-0957-3>
35. *Xie Y.-P., Shen Y.-L., Duan G.-X., Han J., Zhang L.-P., Lu X.* // *Mater. Chem. Front.* 2020. V. 4. P. 2205.
<https://doi.org/10.1039/D0QM00117A>

INFORMATION ENTROPY OF CATALYTIC REACTION

A. D. Zimina^a, A. A. Tukhbatullina^a, and D. Sh. Sabirov^{a,*}

^a*Institute of Petrochemistry and Catalysis, Ufa Federal Research Centre, Russian Academy of Sciences, 450075 Ufa, Republic of Bashkortostan, Russian Federation*

[#]*E-mail: diozno@mail.ru*

The indices based of information entropy are widely used as structural descriptors in chemistry. The change in information entropy in a chemical reaction is calculated as the deference between the values that correspond to the ensemble of products and ensemble of reactants. For the generalized scheme of a catalytic reaction, we derived the analytical expressions that connect its information entropy with the parameters of separate stages and corresponding summative equation. As found, the sum of the parameters of separate stages is proportional to the information entropy change in the formal non-catalytic reaction, and the fraction of the atoms of reacting (forming) molecules in the ensemble of initial substances (or products).

Keywords: information entropy, cooperative entropy, molecular ensemble, chemical reaction, catalysis, elementary stages