

Тематическое направление: Взаимосвязь "структура-свойство". Часть I.

ТОПОЛОГИЧЕСКИЙ ПОДХОД К ОПИСАНИЮ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ, СОДЕРЖАЩИХ ГЕТЕРОАТОМЫ.

© Урядов Владимир Георгиевич,^{*+1} Курдюков Александр Иванович,²
Аристова Наталья Васильевна¹ и Офицеров Евгений Николаевич¹

¹Кафедра органической химии. Казанский государственный технологический университет.
Ул. К. Маркса, 68. г. Казань 420015. Россия. Тел.: (8432) 761-253. E-mail: uryadov@kstu.ru

²Центр новых информационных технологий. Казанский государственный технологический университет.
Ул. К. Маркса, 68. г. Казань 420015. Россия. Факс: (8432) 933-046. E-mail: akourdi@kstu.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: топологический индекс Винера, термодинамические свойства молекул, корреляционные уравнения.

Резюме

Изучена взаимосвязь топологического индекса Винера и индекса распределения электронной плотности Бончева с полными электронными энергиями, энергиями ВЗМО и НСМО, теплоемкостями, стандартными энтальпиями и энтропиями образования, критическими параметрами, температурой кипения и удельными объемами ряда алифатических и ароматических соединений, их галогензамещенных, а также простых и сложных эфиров. Высказано предположение, что для рассмотренного круга веществ экстенсивные термодинамические свойства являются линейной функцией топологии молекул.