

**Полная исследовательская публикация** *Тематический раздел:* Теоретическая и компьютерная химия.  
*Регистрационный код публикации:* 10-20-4-34 *Подраздел:* Физическая органическая химия.  
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции “*Бутлеровские чтения*”. <http://butlerov.com/readings/>  
УДК 547.68+541.124/128. Поступила в редакцию 7 июня 2010 г.

*Тематическое направление:* Численная характеристика структуры органической молекулы.  
Часть 12.

## **Зависимость параметров уравнения состояния от топологических характеристик структуры органических молекул**

© **Урядов Владимир Георгиевич**,<sup>1+</sup> **Аристова Наталья Васильевна**,<sup>2</sup>  
**Соколов Юрий Александрович**<sup>1</sup> и **Офицеров Евгений Николаевич**<sup>3\*</sup>

<sup>1</sup> *Кафедра органической химии. Казанский государственный технологический университет.*  
*Ул. К. Маркса, 68. г. Казань, 420015. Россия. Тел.: (8432) 638-795. E-mail: uryadov@kstu.ru*

<sup>2</sup> *Кафедра химии. Казанский государственный энергетический университет.*

*Ул. Красносельская, 51. г. Казань, 420066. Россия. Тел.: (8435) 194-224. E-mail: aristova@kstu.ru*

<sup>3</sup> *Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева. Миусская пл., 9.*  
*г. Москва, 125047. Россия. Тел.: (495) 978-87-33. E-mail: ofitser@mail.ru*

\*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

**Ключевые слова:** *топологический индекс, параметры состояния, постоянные Ван-дер-Ваальса.*

### **Аннотация**

Для ряда алканов нормального строения получены зависимости постоянных Ван-дер-Ваальса, параметров характеризующих зависимость мольного объема от температуры и второго вириального коэффициента от степеней произведения молярной массы на значение топологического индекса в степени 2/3.