

Тематический раздел: Теоретическая
и компьютерная химия.

Полная исследовательская публикация

Подраздел: Физическая органическая химия.

Регистрационный код публикации: 11-26-10-1

Публикация доступна для обсуждения в интернет как материал "Всероссийской рабочей химической конференции "Бутлеровское наследие-2011". <http://butlerov.com/bh-2011/>

Поступила в редакцию 25 января 2011 г. УДК 547.68+541.124/128.

Тематическое направление: Численная характеристика структуры органической молекулы.
Часть 13.

Взаимосвязь геометрии алканов нормального строения с моментами инерции вращательного движения

© Офицеров Евгений Николаевич,^{1*} Власенко Юлия Васильевна¹
и Урядов Владимир Георгиевич²⁺

¹ 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

² Кафедра органической химии. Казанский государственный технологический университет.
Ул. К. Маркса, 68. г. Казань, 420015. Россия. Тел.: (432) 63-87-95. E-mail: uryadov@kstu.ru

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: момент инерции вращательного движения, топологический индекс.

Аннотация

Для ряда алканов нормального строения проведено исследование взаимосвязи геометрии молекулы и количества атомов углерода в молекуле алкана с особенностями описания компонентов момента инерции вращательного движения.