

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Теоретическая и компьютерная химия.
Регистрационный код публикации: 11-26-10-12 *Подраздел:* Физическая органическая химия.
Публикация доступна для обсуждения в интернет как материал “Всероссийской рабочей химической конференции “Бутлеровское наследие-2011”. <http://butlerov.com/bh-2011/>
УДК 547.68+541.124/128. Поступила в редакцию 25 января 2011 г.

Тематическое направление: Численная характеристика структуры органической молекулы.
Часть 14.

Исследование взаимосвязи температур фазовых переходов ряда 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, физико-химические свойства.*

Аннотация

Для ряда алканов нормального строения проведено исследование взаимосвязи количества атомов углерода в молекуле алкана, топологического индекса, произведения молярной массы на значение топологического индекса в степени 2/3 между собой, а также с температурами плавления, кипения и критической температурой.