

Тематический раздел: Теоретические исследования.
Подраздел: Физическая органическая химия.

Полная исследовательская публикация

Регистрационный код публикации: 14-37-3-157

Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "Бутлеровские чтения". <http://butlerov.com/readings/>
Поступила в редакцию 18 ноября 2013 г. УДК 547(075).

Тематическое направление: Численная характеристика структуры органической молекулы.
Часть 16.

Взаимосвязь температуры плавления фтор-хлор-, и бромпроизводных алканов нормального строения с моментами инерции вращательного движения

© **Офицеров^{1*} Евгений Николаевич, Власенко¹ Юлия Васильевна и Урядов²⁺ Владимир Георгиевич**

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.: (8432) 63-87-95. E-mail: uryadov@kstu.ru*

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: момент инерции вращательного движения, топологический индекс, температуры плавления и кипения, галогенпроизводные алканов.

Аннотация

Для ряда бром-, фтор- и хлорпроизводных алканов нормального строения проведено исследование методами корреляционного анализа взаимосвязи температур плавления и температур кипения рассматриваемых веществ с характеристиками структуры и компонентами момента инерции вращательного движения молекул, а также с новым энерго-структурным параметром E_w (отношение полной электронной энергии (E) к значению топологического индекса Винера в степени $2/3$).

Зависимости температуры плавления и температуры кипения рассматриваемых веществ от характеристик структуры и компонентов момента инерции вращательного движения молекул, а так же от энерго-структурного параметра указывают на различные формы движения молекул в точках фазовых переходов.