

## Исследование взаимосвязи реологических, квантовых и структурно-химических характеристик жидких ароматических углеводородов

© Доломатов<sup>1,2\*</sup> Михаил Юрьевич и Ковалева<sup>1+</sup> Элла Александровна

<sup>1</sup> Уфимский государственный нефтяной технический университет.

ул. Космонавтов, 1. г. Уфа, 450062. Республика Башкортостан. Россия.

Тел.: (917) 406-27-06. E-mail: kovaleva-ugntu@yandex.ru

<sup>2</sup> Физико-технический Институт Башкирского государственного университета.

ул. Заки Валиди, 32. г. Уфа, 450074. Республика Башкортостан. Россия. E-mail: mdolomatov@bk.ru

\*Ведущий направление; + Поддерживающий переписку

**Ключевые слова:** коэффициенты динамической вязкости, энергия активации вязкого течения, энтропия вязкого течения, предэкспонента Аррениуса, кинетический компенсационный эффект, топологический индекс, потенциал ионизации.

### Аннотация

Предложен подход, позволяющий рассчитать динамическую вязкость ароматических углеводородов в жидком состоянии, используя квантовые (потенциалы ионизации) и молекулярные (топологические индексы) параметры. Исследованы соединения бензола, нафталина и замещенных ароматических углеводородов. Из формулы Аррениуса-Френкеля-Эйринга определены энергии активации вязкого течения и логарифмы предэкспоненты Аррениуса. Величина энергии активации вязкого течения служит косвенной характеристикой энергии межмолекулярного взаимодействия частиц. При исследовании жидких ароматических углеводородов был обнаружен кинетический компенсационный эффект, который выражается в зависимости логарифма эффективной предэкспоненты уравнения Аррениуса от эффективной энергии активации. Его достоверность подтверждает коэффициент аппроксимации  $R^2 = 0.82$ . Рассчитаны структурные параметры – топологические индексы Винера, Рандича и Харари. Топологические индексы рассчитаны на основе описания структурной формулы молекулы в виде графа, выражаются одним числом и представляют интерес при исследовании QSPR/QSAR моделей. Полагая, что энергии молекул одного и того же вещества равны, можем считать, что равны и их энергии (потенциалы) ионизации. Значения потенциалов ионизации жидких аренов, рассчитанных нами методом ТФП (B3LYP/6-31G(d)) с полной оптимизацией геометрии молекул, совпали с экспериментальными значениями полученными другими авторами методом фотоионизации. В рамках модели QSPR предложена двухпараметрическая зависимость, согласно которой энергия активации вязкого течения зависит от потенциала ионизации и топологического индекса. Данную зависимость можно применять для других классов соединений при наличии данных. Рассчитана энтропия вязкого течения. Результаты расчетов подтверждены статистической обработкой экспериментальных данных.