

Полная исследовательская публикация Тематический раздел: Физико-химические исследования.
Идентификатор ссылки на объект – ROI: jbc-01/17-52-11-74 Подраздел: Физическая органическая химия.
Цифровой идентификатор объекта – <https://doi.org/10.37952/ROI-jbc-01/17-52-11-74>
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции “*Бутлеровские чтения*”. <http://butlerov.com/readings/>
УДК 547.21. Поступила в редакцию 13 ноября 2017 г.

Взаимосвязь критических характеристик фазового перехода жидкость-пар с топологическими характеристиками молекул ароматических углеводов

© Доломатов^{1,2} Михаил Юрьевич, Аубекеров¹⁺ Тимур Мендбайулы,
Вагапова¹ Элина Венеровна, Ахтямова¹ Камила Ришатовна
и Евдоким Анатолевич Кузнецов¹

¹ Уфимский государственный нефтяной технический университет. ул. Космонавтов, 1.
г. Уфа, 450062. Республика Башкортостан. Россия. Тел.: (89603) 86-71-85.

E-mail: timur_1995@inbox.ru

² Башкирский государственный университет. ул. Заки Валиди, 32. г. Уфа, 450076.

Республика Башкортостан. Россия.

Тел.: (89603) 86-71-85. E-mail: timur_1995@inbox.ru

*Ведущий направление; + Поддерживающий переписку

Ключевые слова: арены, критические свойства, критическая температура, критическое давление, коэффициент сжимаемости, индекс Винера, индекс Рандича, топологические параметры, собственные значения топологической матрицы.

Аннотация

Расчет критических параметров аренов, таких как температура, давление, коэффициент сжимаемости и другие необходим для проведения инженерных расчетов в энергетике, трубопроводном транспорте, химической технологии, нефтехимии и решении научных задач. В настоящее время известно большее количество способов расчета физико-химических свойств (ФХС) на основе структурных молекулярных характеристик. Существуют различные методы оценки ФХС, основанные на методе суммирования инкрементов и критических параметрах веществ по их структурным, информационным характеристикам, а также теории фазовых переходов. Кроме того, существует группа методов, использующая структурные топологические параметры молекул – модели QSPR (Quantitative Structure–Properties Relationship), которые являются по сути математическим отражением положения теории Бутлерова о влиянии структур на свойства органических веществ.

Предложена нелинейная модель для расчета критических констант (температуры, давления и коэффициента сжимаемости) аренов через топологические характеристики молекулярных графов: индексов Винера и Рандича и функции собственных значений топологической матрицы молекулы.