

Полная исследовательская публикация Тематический раздел: Физико-химические исследования.
Идентификатор ссылки на объект – ROI: jbc-01/18-53-2-80 Подраздел: Физическая органическая химия.
Цифровой идентификатор объекта – <https://doi.org/10.37952/ROI-jbc-01/18-53-2-80>
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции “*Бутлеровские чтения*”. <http://butlerov.com/readings/>
Статья публикуется по материалам 2-го этапа *Мини-Симпозиума “Бутлеровское наследие – 17-18”* (г. Казань).
УДК 547.21. Поступила в редакцию 18 января 2018 г.

Топологический подход к расчету теплоёмкости предельных углеводородов

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

¹ Уфимский государственный нефтяной технический университет.
ул. Космонавтов, 1. г. Уфа, 450062. Республика Башкортостан. Россия.

Тел.: (347) 242-03-70. E-mail: info@rusoil.net

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: QSPR-модели; молярная теплоемкость; физико-химические свойства; индекс Винера; индекс Рандича; топологические параметры; собственные значения топологической матрицы.

Аннотация

Исследование и моделирование физико-химических свойств веществ является сложной и актуальной задачей. Теплоемкость является важной теплофизической характеристикой вещества, которая часто необходима при проведении технологических, научных и инженерных расчетов. На сегодняшний день предложено не так много методик расчета данной величины, однако и они не достаточно точны.

Целью данной работы является разработка топологической модели типа структура-свойство для адекватного расчета теплоемкости углеводородов ряда алканов. Адекватность модели подтверждается статистической обработкой данных. Приведено сравнение справочных и расчетных значений свойства, показывающее высокую адекватность предлагаемой модели. Результаты могут быть использованы в научных и инженерных расчетах.