

Прогнозирование физико-химических свойств алкилнафталинов с применением квантовых дескрипторов

© Доломатов^{1,2*} Михаил Юрьевич, Паймурзина²⁺ Наталья Халитовна, Ковалева² Элла Александровна и Валева² Наиля Сибагатовна

¹ Физико-технический институт. Башкирский государственный университет. ул. Заки Валиди, 32. г. Уфа, 450076. Республика Башкортостан. Россия. Тел.: (965) 934-67-40. E-mail: paimurzina@inbox.ru

² Уфимский государственный нефтяной технический университет. ул. Космонавтов, 1. г. Уфа, 450062. Республика Башкортостан. Россия.

*Ведущий направления; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: дескрипторы, структура-свойства, потенциал ионизации, число электронов, алкилнафталины, макроскопические свойства, квантовые свойства.

Аннотация

Алкилзамещенные нафталины (АН) содержатся в средних фракциях с температурами кипения 200-350 °С большинства нефтей и в каменноугольных смолах. Для прогнозирования физико-химических свойств АН разработана QSPR-модель на основе квантово-химических дескрипторов. В качестве квантово-химических дескрипторов использованы первые потенциалы ионизации (ПИ) равные отрицательной энергии высших занятых молекулярных орбиталей (ВЗМО), и общее число электронов неионизированной молекулы. В качестве макроскопических физико-химических свойств ПАУ ряда нафталина изучены: теплопроводность газа, вязкость газа, теплоемкость жидкости, вязкость жидкости, теплота испарение. ПИ вычислены методом функционала плотности DFT. Полученные модели позволяют проводить оценки физико-химических свойств с достаточной для практических приложений точностью, так как проводимые оценки ФХС обладают достаточной для практических приложений ошибкой прогноза в пределах 1.77-2.83%. Данная модель представляет интерес с теоретической точки зрения, так как свидетельствует о существовании эффектов взаимосвязи макроскопических и квантовых свойств в рядах замещенных нафталинов. Эта модель позволяет прогнозировать такие ФХС алкилнафталинов, как теплопроводность газа, вязкость газа, теплоемкость жидкости, теплота испарение с достаточной для практических приложений точностью. Использование предложенной модели позволит сократить количество измерений различных алкилпроизводных нафталинов и синтезировать новые соединения с заданными свойствами.