

Тематическое направление: Численная характеристика структуры органической молекулы. Часть 20.

## Взаимосвязь ацентрического фактора соструктурно-массовым параметром в ряду *n*-алканов и 1-галоген-*n*-алканов

© Урядов<sup>+2</sup> Владимир Георгиевич, Коверда<sup>1</sup> Михаил Николаевич  
и Офицеров\*<sup>1</sup> Евгений Николаевич

<sup>1</sup> Кафедра химии и технологии биомедицинских препаратов. Факультет химико-фармацевтических технологий и биомедицинских препаратов. Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева. Миусская пл., 9. г. Москва, 125047. Россия.

Тел.: (495) 978-32-61. E-mail: ofitser@mail.ru

<sup>2</sup> Фонд им. А.М. Бутлерова. ул. К. Маркса, 68. г. Казань, 420015. Россия.

Тел.: (843) 263-87-95. E-mail: vguryadov@mail.ru

\*Ведущий направление; <sup>+</sup>Поддерживающий переписку

**Ключевые слова:** топологический индекс, *n*-алканы, 1-галоген-*n*-алканы, ацентрический фактор, температура плавления, энтальпия испарения, индекс Питцера, вращательная степень свободы.

### Аннотация

На примере ряда алканов нормального строения, а также ряда 1-галоген-*n*-алканов ведется дальнейшее исследование особенностей взаимосвязи физико-химических свойств органических соединений с произведением молярной массы на значение топологического индекса Винера в степени 2/3. Данная величина рассматривается как характеристика момента инерции вращательного движения молекул и находится в корреляционной взаимосвязи практически со всеми физико-химическими свойствами неэлектролитов в жидкой фазе. Линейные корреляции «структура – свойство», характеризующие высокими значениями коэффициента корреляции, выполняются при использовании в качестве аргумента нецелочисленных степеней указанного произведения. Особенностью строения молекул *n*-алканов и 1-галоген-*n*-алканов является их топологически-структурная идентичность. Данное явление названо «изотопология». Для изотопологических систем допускается выполнение принципа термодинамического подобия. Одним из определяющих чисел теории термодинамического подобия является ацентрический фактор Питцера. В предлагаемой работе рассматривается взаимосвязь ацентрического фактора Питцера, а также температуры плавления и энтальпии испарения, рассматриваемых соединений – с произведением молярной массы на значение топологического индекса Винера в степени 2/3. Указанная величина в степени 1/4 коррелирует с ацентрическим фактором серии *n*-алканов, а также 1-бром-, 1-фтор- и 1-хлор-*n*-алканов. При этом каждый набор гомологов формирует собственную зависимость. Однако введение поправок к показателю степени на основании отношения электронных энергий алканов и изотопологических 1-галоген-*n*-алканов позволяет получить общую зависимость, охватывающую весь массив данных рассматриваемых соединений. Аналогичным образом получены две общие зависимости для температуры плавления рассматриваемых соединений с четным и нечетным количеством атомов в скелетах молекул, включая гетероатом. Возможность построения общих зависимостей путем введения поправок использована для прогнозирования энтальпии испарения некоторых галогеналканов, для которых не установлены экспериментальные данные, что свидетельствует о перспективности предложенного подхода.