

Тематическое направление: Численная характеристика структуры органической молекулы.
Часть 21.

Ацентрический фактор молекул и структурно-массовый параметр 2- и 3-метил- и 2- и 3-галоген- *n*-алканов

© Урядов²⁺ Владимир Георгиевич, Коверда¹ Михаил Николаевич
и Офицер^{1*} Евгений Николаевич

¹ 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

² 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; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: топологический индекс, 2- и 3-метил-*n*-алканы, 2- и 3-галоген-*n*-алканы, ацентрический фактор, индекс Питцера, вращательная степень свободы, топологическая характеристика момента инерции вращательного движения.

Аннотация

На примере ряда 2- и 3-метил-*n*-алканов и 2- и 3-галоген-*n*-алканов, где галоген: бром, фтор и хлор – ведется исследование возможности использования произведения молярной массы на значение топологического индекса Винера в степени 2/3 (J_W) для прогнозирования различных физико-химических свойств органических соединений в жидкой фазе. Указанная величина рассматривается как топологическая характеристика момента инерции вращательного движения, а ее нецелочисленные степени находятся в линейной корреляционной взаимосвязи со свойствами органических соединений. Особенностью строения молекул 2- и 3-метил-*n*-алканов и 2- и 3-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 или фактор ацентричности Питцера. Численные значения ацентрического фактора можно рассчитать, используя данные по критическому давлению, критической температуре и температуре кипения. Выполненные для серии 2- и 3-метил-*n*-алканов расчёты значений фактора Питцера коррелируют с величинами J_W в степени 1/4. При этом каждый из двух наборов гомологов формирует собственную зависимость, соответствующую замещениям во 2 и 3 положениях. 2- и 3-Метил-*n*-алканы являются системами, изотопологическими 2- и 3-галоген-*n*-алканам. Соответственно, для этих соединений должен выполняться принцип подобия. С учетом этого, на основании отношения энергии атомизации алкилзамещенных алканов к энергии атомизации галогензамещенных алканов рассчитаны значения поправок к показателю степени J_W 2-, 3-галоген-*n*-алканов. С использованием поправок для рассматриваемых алкилгалогенидов произведен расчет значений критического давления, критической температуры и температуры кипения, и далее – ацентрического фактора. Расчетные значения последней величины формируют две выборки данных, соответствующих 2-галогензамещенным и 3-галогензамещенным алканам. С учетом поправок на основе отношения энергии атомизации получены общие зависимости ацентрического фактора от J_W в нецелочисленной степени, включающие метилалканы и галогеналканы, что рассматривается как свидетельство правомочности подхода и достоверности полученных результатов.