

Тематическое направление: Численная характеристика структуры органической молекулы.
Часть 22.

Взаимосвязь температуры плавления и энтальпии испарения 2- и 3-галоген-*n*-алканов со структурно-массовым параметром

© Урядов²⁺ Владимир Георгиевич, Коверда¹ Михаил Николаевич
и Офицеров^{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: vgyuradov@mail.ru

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: топологический индекс, изотопология, температура плавления, энтальпия испарения, энергия атомизации.

Аннотация

Для прогнозирования физико-химических свойств органических соединений в жидкой фазе расчетным путем нами используются нецелочисленные степени произведения молярной массы на значение топологического индекса Винера в степени 2/3 (J_w). Рассматриваются топологически-структурно идентичные (изотопологические) системы, в частности *n*-алканы и 1-галоген-*n*-алканы. Для расчета значений температуры плавления 2- и 3-галоген-*n*-алканов расширен круг значений температуры плавления 2- и 3-метил-*n*-алканов. Для этого использованы имеющихся в литературе экспериментальные данные по значениям этой величины для ряда метилзамещенных *n*-алканов из числа рассматриваемых в данной работе. Полученные, а также литературные данные использованы для расчета значений температуры плавления галогеналканов. Расчеты проводились с учетом поправок рассчитываемых на основании отношения энергии атомизации изотопологических галогеналканов и метилалканов, поскольку изотопология допускает выполнение принципа термодинамического подобия. Полученные значения формируют четыре массива точек, во-первых, по признаку 2- и 3-замещения, и во-вторых по признаку четности. При этом каждый массив представляет собой одну прямую, которая располагается ниже графика зависимости температуры плавления от J_w в нецелочисленной степени для изотопологических 2- и 3-метил-*n*-алканов. В отличие от температуры плавления энтальпия испарения нечувствительна к четности атомов углерода, ее особенностью является близость значений для изомеров, относящихся к одному ряду и классу. С учетом этого, на основании положения о подобии свойств изотопологических систем, определены значения энтальпии испарения ряда 2- и 3-метил-*n*-алканов и 2- и 3-галоген-*n*-алканов. Полученные значения формируют совокупности точек, соответствующих изомерным соединениям, при этом отслеживается выраженная зависимость от массы заместителя во 2 и 3 положениях. В пределах серии значения энтальпии изменяются симбатно изменению массы. Совокупность зависимостей рассматриваемых физико-химических свойств от значений J_w в нецелочисленных степенях, позволяет использовать данный параметр для систематизации свойств органических соединений.