

Численная характеристика структуры органической молекулы. Часть 23. Взаимосвязь характеристик энергии молекул со структурно-массовым параметром

© Урядов^{1*} Владимир Георгиевич, Курдюков^{1,2} Александр Иванович,
Гумеров² Фарид Мухамедович, Зарипов² Зуфар Ибрагимович,
Габитова² Асия Радифовна

¹ Научный фонд им. А.М. Бутлерова. ул. Бондаренко, 33-44. г. Казань, 420066.

Республика Татарстан. Россия. Тел.: +7 (843) 263-87-95. E-mail: vgyuradov@mail.ru

² Кафедра теоретических основ теплотехники. Казанский национальный исследовательский технологический университет. ул. К. Маркса, 68. г. Казань, 420015. Республика Татарстан. Россия. Тел.: +7 (843) 231-42-11. E-mail: butlerov@mail.ru

*Ведущий направление; †Поддерживающий переписку

Ключевые слова: топологический индекс, полная энергия молекул, энергия атомизации молекул.

Аннотация

Ведется систематическое исследование взаимосвязи физико-химических свойств (ФХС) органических соединений с произведением молярной массы на значение топологического индекса Винера в степени $2/3$ (J_w) и находится в корреляционной взаимосвязи практически со всеми ФХС неэлектролитов. Линейные корреляции «структура – свойство», характеризуемые высокими значениями коэффициента корреляции, выполняются при использовании в качестве аргумента нецелочисленных степеней указанного произведения.

В работе рассмотрена взаимосвязь полной электронной энергии молекул и энергии атомизации с J_w в степени $1/3$. Объектами исследования были: алканы, амины, фтор-, хлор- и бромалканы. Рассматривались гомологи нормального строения, 2-замещенные и 3-замещенные. Получены линейные зависимости, характеризуемые значениями коэффициента корреляции близкими к единице. Это указывает на закономерную взаимосвязь энергетических характеристик и J_w в степени $1/3$. Характерной особенностью полученных линейных уравнений явилась закономерная взаимосвязь свободного члена и углового коэффициента с природой гетероатомов. Сводный член уравнений, описывающих полную электронную энергию, находится во взаимосвязи с квадратом атомной массы гетероатома. Сводный член в уравнениях, описывающих взаимосвязь J_w в степени $1/3$ с энергией атомизации, находится во взаимосвязи с величиной обратной атомной массе гетероатома. Для углового коэффициента отслеживается деление на группы по принадлежности гетероатомов к периоду в таблице Менделеева. Одну группу формируют: углерод, азот и фтор, другая группа для хлора и третья для брома. Полученные результаты имеют значение для разработки методов прогнозирования ФХС органических и элементоорганических соединений.

Выходные данные для цитирования русскоязычной версии статьи:

Урядов В.Г., Курдюков А.И., Гумеров Ф.М. Зарипов З.И., Габитова А.Р. Численная характеристика структуры органической молекулы. Часть 23. Взаимосвязь характеристик энергии молекул со структурно-массовым параметром. *Бутлеровские сообщения*. 2022. Т.69. №1. С.1-11. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/22-69-1-1.

или

Vladimir G. Uryadov, Alexandre I. Kourdioukov, Farid M. Gumerov, Zufar I. Zaripov, Asia R. Gabitova. Numerical characterization of the structure of an organic molecule. Part 23. Interrelation of characteristics of energy of molecules with structural-mass parameter *Butlerov Communications*. 2022. Vol.69. No.1. P.1-11. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/22-69-1-1. (Russian)