

## Численная характеристика структуры органической молекулы. Часть 24. Взаимосвязь критической температуры и критического давления 1-амино-*n*-алканов со структурно-массовым параметром

© Урядов<sup>1\*</sup> Владимир Георгиевич, Курдюков<sup>1,2</sup> Александр Иванович,  
Гумеров<sup>2</sup> Фарид Мухамедович, Зарипов<sup>2</sup> Зуфар Ибрагимович,  
Габитова<sup>2</sup> Асия Радифовна

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

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

<sup>2</sup> 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; <sup>†</sup>Поддерживающий переписку

**Ключевые слова:** топологический индекс, структурно-массовый параметр, критические параметры, энтальпия испарения, температура плавления.

### Аннотация

Для прогнозирования физико-химических свойств (ФХС) органических соединений в жидкой фазе расчетным путем используются нецелочисленные степени произведения молярной массы на значение топологического индекса Винера в степени 2/3. Рассматриваются топологически-структурно идентичные (изотопологические) системы. В частности *n*-алканы, 1-галоген-*n*-алканы, *n*-алканола-1 и 1-амино-*n*-алканы. Для изотопологических систем выполняется принцип термодинамического подобия, что позволяет, используя известные данные по значениям ФХС соединений одного класса, производить расчет неизвестных значений ФХС изотопологических систем, принадлежащих к другому классу органических соединений.

Основой возможности прогнозирования является ярко выраженная линейная взаимосвязь, между указанной величиной и ФХС органических соединений различных рядов, классов, а также способных ассоциировать и вступать в специфические межмолекулярные взаимодействия. Линейные зависимости характеризуются коэффициентом корреляции с высокими – стремящимися к единице – значениями. Каждому ФХС соответствует строго определенный показатель степени произведения молярной массы на значение топологического индекса в степени 2/3. Полагается, что показатели степени являются функциями электронной энергии молекул и для изотопологических систем значения этих функций пропорциональны.

На основе подхода с позиций изотопологии произведен расчет значений критического давления ряда 1-амино-*n*-алканы. В качестве изотопологической системы рассмотрены *n*-алканола-1. Однако для других рассматриваемых ФХС (критическая температура, температура кипения, температура плавления и энтальпия испарения) удовлетворительных результатов не было получено, что может быть связано с различием кислотно-основных свойств спиртов и аминов, а также различиями в способности образовывать ассоциаты.

Для расчета значений указанных ФХС были построены системы линейных уравнений на основе литературных данных. Из системы линейных уравнений определены параметры линейных уравнений, охватывающих литературные данные. Эти уравнения использованы для расчета прогнозируемых значений указанных ФХС. Соответствие между литературными данными и расчетными значениями позволяет рассматривать последние как достоверные.

### 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 24. Взаимосвязь критической температуры и критического давления 1-амино-*n*-алканов со структурно-массовым параметром. *Бутлеровские сообщения*. 2022. Т.69. №1. С.12-23. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/22-69-1-12.

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 24. Interrelation of the critical temperature and critical pressure of 1-amino-*n*-alkanes with structural-mass parameter. *Butlerov Communications*. 2022. Vol.69. No.1. P.12-23. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/22-69-1-12. (Russian)

12 \_\_\_\_\_ © Бутлеровские сообщения. 2022. Т.69. №1. \_\_\_\_\_ г. Казань. Республика Татарстан. Россия.