

Численная характеристика структуры органической молекулы. Часть 25.

Взаимосвязь некоторых физико-химических свойств 2-, 3-*n*-алканолов и 2-, 3-амино-*n*-алканов со структурно-массовым параметром

© Урядов^{1*} Владимир Георгиевич, Гумеров² Фарид Мухамедович,
Зарипов^{2*} Зуфар Ибрагимович, Мазанов¹ Сергей Валерьевич,
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: vgyuryadov@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, структурно-массовый параметр, температура плавления, температура кипения, энтальпия испарения.

Аннотация

Ведется исследование взаимосвязи физико-химических свойств (ФХС) органических соединений в жидкой фазе с нецелочисленными степенями произведения молярной массы на значение топологического индекса Винера в степени 2/3 (СМП). Рассматриваются структурно-идентичные (изотопологические) системы. В частности 2- и 3-*n*-алканолы и 2- и 3-амино-*n*-алканы. Алканолы и амины являются системами с ярко выраженной склонностью к специфическим межмолекулярным взаимодействиям, поэтому некоторые ФХС этих соединений различаются существенным образом. Соответственно рассмотрение ФХС целесообразно проводить в рамках одного класса.

С использованием литературных данных по температуре плавления ($T_{пл}$) 2- и 3-*n*-алканолов построены линейные зависимости $T_{пл}$ от СМП в нецелочисленной степени. Данные зависимости использованы для расчета значений $T_{пл}$ некоторых алканолов из круга рассматриваемых, для которых не уставлены по литературе значения $T_{пл}$. Таким же образом определены значения температуры кипения и энтальпии испарения ряда 2- и 3-амино-*n*-алканов. Полученные результаты показывают, что изомерные соединения, принадлежащие к одному классу органических соединений, имеют практически равные значения энтальпии испарения.

Набранная представительная статистика по $T_{пл}$ органических соединений, включающих в свой состав гетероатомы второго периода таблицы Менделеева, позволила провести сопоставление свободных членов и угловых коэффициентов линейных уравнений взаимосвязи $T_{пл}$ и нецелочисленной степени СМП. Данная взаимосвязь является линейной. При этом учитывается четность количества атомов углерода, а также различия в топологии. С использованием данной взаимосвязи, а также закономерностей взаимосвязи угловых коэффициентов зависимостей $T_{пл}$ от степени СМП и самих этих зависимостей – разработана программа для редактора *Excel* для расчета значений $T_{пл}$. По данной программе рассчитаны значения $T_{пл}$ ряда 2- и 3-амино-*n*-алканов из круга рассматриваемых соединений. Полученные значения соответствуют экспериментальным данным для аналогичных систем, что их позволяет рассматривать как достоверные.

Выходные данные для цитирования русскоязычной версии статьи:

Урядов В.Г., Гумеров Ф.М., Зарипов З.И., Мазанов С.В., Габитова А.Р. Численная характеристика структуры органической молекулы. Часть 25. Взаимосвязь некоторых физико-химических свойств 2-, 3-*n*-алканолов и 2-, 3-амино-*n*-алканов со структурно-массовым параметром. *Бутлеровские сообщения*. 2022. Т.70. №5. С.1-13. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/22-70-5-1.

или

Vladimir G. Uryadov, Farid M. Gumerov, Zufar I. Zaripov, Sergey V. Mazanov, Asia R. Gabitova. Numerical characterization of the structure of an organic molecule. Part 25. Interrelation of some physical and chemical properties 2-, 3-*n*-alkanols and 2-, 3-amino-*n*-alkanes with structural-mass parameter. *Butlerov Communications*. 2022. Vol.70. No.5. P.1-13. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/22-70-5-1. (Russian)