

Численная характеристика структуры органической молекулы. Часть 26. Взаимосвязь критических параметров 2- и 3-амино-*n*-алканов со структурно-массовым параметром

© Урядов^{1*} Владимир Георгиевич, Гумеров² Фарид Мухамедович,
Зарипов² Zufar Ибрагимович, Мазанов² 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: vgyryadov@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, критическое давление, критическая температура.

Аннотация

Наработан значительный объем данных по физико-химическим свойствам (ФХС) органических соединений расчетным путем с использованием нецелочисленных степеней произведения молярной массы на значение топологического индекса Винера в степени 2/3 (СМП). Это позволило, на примере температуры плавления соединений с гетероатомами второго периода, выявить линейную взаимосвязь свободного члена и углового коэффициента в уравнениях зависимости ФХС от СМП в нецелочисленной степени. Полученная зависимость открыла новые возможности для расчета значений ФХС. В качестве дополнительного использовано условие нормального соотношения «активность – селективность» в рядах изомеров, принадлежащих к одному классу органических соединений. Соответственно для изомеров одного класса получено выражение взаимосвязи угловых коэффициентов уравнений зависимости ФХС от СМП в нецелочисленной степени.

Для выявления общности характера взаимосвязи свободного члена и углового коэффициента в уравнениях зависимости ФХС от СМП в нецелочисленной степени произведен расчет значений критического давления ряда 2- и 3-*n*-алканолов и 2- и 3-амино-*n*-алканов, а также критической температуры ряда 2- и 3-амино-*n*-алканов. На основании литературных данных были построены уравнения зависимости критического давления и критической температуры от СМП в нецелочисленных степенях. Полученные значения свободного члена и углового коэффициента использованы для построения уравнений взаимосвязи свободного члена и углового коэффициента. Уравнения характеризуются коэффициентом корреляции с удовлетворительными значениями. Также получены дополнительные данные на основании взаимосвязи угловых коэффициентов линейных зависимостей ФХС от СМП в нецелочисленной степени. Указанные данные, а также значения СМП в нецелочисленной степени для каждого отдельно взятого соединения использованы для расчета значений рассматриваемых ФХС, по разработанной нами программе для редактора *Excel*.

Полученные значения формируют закономерные системы, включающие отдельные литературные данные, что позволяет рассматривать эти значения 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 26. Взаимосвязь критических параметров 2- и 3-амино-*n*-алканов со структурно-массовым параметром. *Бутлеровские сообщения*. 2022. Т.71. №7. С.29-40. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/22-71-7-29

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 26. Interrelation of critical parameters 2- and 3-amino-*n*-alkanes with structurally-mass parameter. *Butlerov Communications*. 2022. Vol.71. No.7. P.29-40. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/22-71-7-29 (Russian)