

Численная характеристика структуры органической молекулы. Часть 27. Взаимосвязь критических параметров 1-*n*-алкантиолов со структурно-массовым параметром

© Урядов^{1*} Владимир Георгиевич, Гумеров² Фарид Мухамедович,
Хайрутдинов² Венер Фаилевич, Зарипов² Зуфар 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: 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, 1-*n*-алкантиолы, температура кипения, энтальпия испарения, критическое давление, критическая температура.

Аннотация

Линейная взаимосвязь значений физико-химических свойств (ФХС) органических соединений с нецелочисленными степенями произведения молярной массы на значение топологического индекса Винера в степени 2/3 (СМП) позволяет существенным образом упростить подход к расчету значений ФХС, которые ранее были неизвестных, или по которым отсутствовала информация в доступной литературе. Принципиальной особенностью является возможность расчета ФХС для серий гомологов. Рассматриваются изотопологические (равной топологии) системы, для которых определяется отношение энергии атомизации, обучающей выборки к энергии атомизации исследуемой выборки. С помощью указанного отношения вычисляются значения углового коэффициента уравнения зависимости ФХС от степени СМП для исследуемой выборки. Выявлена линейная взаимосвязь между параметрами уравнений взаимосвязи ФХС и СМП, которая используется в качестве критерия достоверности расчетных значений исследуемой выборки. Для одного ФХС графики взаимосвязи ФХС и СМП в нецелочисленной степени нескольких серий соединений различной природы формируют пучок сходящихся прямых. Точка пересечения этих прямых является постоянной величиной и рассматривается как отправная при выполнении расчетов.

С помощью указанных операций произведен расчет температуры кипения, энтальпии испарения, критического давления и критической температуры ряда 1-*n*-алкантиолов. Расчет значений температуры кипения производился с использованием в качестве обучающей выборки данных по 1-хлор-*n*-алканам. Расчеты энтальпии испарения и критической температуры проводились при использовании в качестве обучающей выборки данных по 1-*n*-алканолом. Критическое давление рассчитывалось при использовании в качестве обучающей выборки 1-амино-*n*-алканов.

Расчеты значений рассматриваемых физико-химических свойств выполнялись 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., Хайрутдинов В.Ф., Зарипов З.И., Мазанов С.В., Габитова А.Р. Численная характеристика структуры органической молекулы. Часть 27. Взаимосвязь критических параметров 1-*n*-алкантиолов со структурно-массовым параметром. *Бутлеровские сообщения*. 2022. Т.71. №8. С.1-15. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/22-71-8-1.

или

Vladimir G. Uryadov, Farid M. Gumerov, Vener F. Khayrutdinov, Zufar I. Zaripov, Sergey V. Mazanov, Asia R. Gabitova. Numerical characterization of the structure of an organic molecule. Part 27. Interrelation of critical parameters 1-*n*-alkanethiols with structural-mass parameter. *Butlerov Communications*. 2022. Vol.71. No.8. P.1-15. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/22-71-8-1 (Russian)