

УДК 541.1

КОРРЕЛЯЦИОННЫЕ ЗАВИСИМОСТИ «ТОПОЛОГИЧЕСКИЙ ИНДЕКС АЛКИНОВ $C_2H_2 - C_9H_{16}$ – ТЕПЛОТА ИСПАРЕНИЯ»

В.В. Гребешков, В.М. Смоляков

Тверской государственный университет, 170002, Россия, г. Тверь, Садовый пер. 35
smolyakov@inbox.ru

Аннотация: Для исследования количественных корреляций «структура 132 алкинов $C_2H_2 - C_9H_{16}$ – свойство» сформированы топологический индекс χ Рандича и индекс Δi^3 . С использованием двухпараметровых функций исследованы количественные корреляции «структура алкинов - свойство». По полученным формулам проведены численные расчеты теплот испарения при нормальной температуре кипения L_{HTK} алкинов $C_2H_2 - C_9H_{16}$, не изученных экспериментально. Рассмотрены графические зависимости «структура алкинов - свойство».

Ключевые слова: топологический индекс, алкины, теплота испарения, корреляционные зависимости «ТИ-свойство алкина».

Цель работы – исследовать корреляционные зависимости «топологический индекс алкинов $C_2H_2 - C_9H_{16}$ – теплота испарения».

В данной работе нами сформулированы следующие задачи:

- построить топологические индексы для ряда алкинов $C_2H_2 - C_9H_{16}$;
- с использованием двухпараметровых функций исследовать количественные корреляции «ТИ алкина – свойство»;
- провести отбор опытных данных по L_{HTK} для ряда алкинов $C_2H_2 - C_9H_{16}$;
- с использованием полученных в работе ТИ провести численные расчеты теплот испарения при нормальной температуре кипения L_{HTK} алкинов, не изученных экспериментально и необходимых для практического использования;
- проанализировать графические зависимости «структура алкинов – свойство».

Топологический индекс – инвариант молекулярного графа в задачах компьютерной химии, некоторое (обычно числовое) значение (или набор значений), характеризующее структуру молекулы. Обычно топологические индексы не отражают кратность химических связей и типы атомов (C , N , O и т.д.), атомы водорода не учитываются. К наиболее известным топологическим индексам относятся индекс Хосои, индекс Винера, индекс Рандича, индекс Балабана и другие [1-5].

В количественных корреляциях «структура-свойство» широко используются аддитивные схемы [6-8] и топологические индексы (ТИ), отражающие структуру молекул гомологического ряда. Используются функции – линейная, экспоненциальная, логарифмическая и др. При таком подходе для аппроксимации свойства исследуемого ряда

необходимо подбирать свой индекс и свою функцию с приемлемыми статистическими характеристиками.

При исследовании корреляционных зависимостей «структура – свойство вещества» вида $P = f(\text{ТИ})$ используются топологические индексы (ТИ), построенные в терминах степеней вершин или расстояний молекулярных графов G [9].

Построение топологических индексов для ряда алкинов $C_2H_2 - C_9H_{16}$.

А) Для учета взаимного влияния невалентных взаимодействий атомов через два скелетных атома по цепи молекулы алкина (второе приближение) в работе сконструирован топологический индекс Рандича χ , учитывающий влияние первого окружения атомов по связям: $-C_i \equiv C_j -$, $\equiv C_i - C_j^* -$, $-C_i^* - C_j -$, $-C_i - C_j -$ в молекуле алкина.

$$\chi = \sum_{i,j=1; j \leq i}^2 [i \cdot j]^{-\frac{1}{2}} n_{-C_i \equiv C_j -} + \sum_{i=2}^2 \sum_{j=1}^4 [i \cdot j]^{-\frac{1}{2}} n_{\equiv C_i - C_j^* -} + \sum_{i=2, j=1}^4 [i \cdot j]^{-\frac{1}{2}} n_{-C_i^* - C_j -} + \sum_{i=1, j=2; i \leq j}^4 [i \cdot j]^{-\frac{1}{2}} n_{-C_i - C_j -}. \quad (1)$$

Здесь $n_{-C_i \equiv C_j -}$, $n_{\equiv C_i - C_j^* -}$, $n_{-C_i^* - C_j -}$, $n_{-C_i - C_j -}$ – числа невалентных взаимодействий пар атомов C через два атома углерода в молекуле алкина. Эти числа могут быть выражены через числа соответствующих фрагментов $-C_i \equiv C_j -$, $\equiv C_i - C_j^* -$, $-C_i^* - C_j -$, $-C_i - C_j -$ в молекуле алкина.

Запишем некоторое физико-химическое свойство $P_{C_nH_{2n-2}}$ в виде [7]:

$$P_{C_nH_{2n-2}} = p_{nC} \cdot a + p_{\chi} \cdot b, \quad (2)$$

где $a = nC$, $b = \chi$ – коэффициенты схемы (2), а p_{nC} , p_{χ} – параметры схемы (2), найденные методом наименьших квадратов по отобраным экспериментальным данным [10] для теплот испарения при нормальной температуре кипения L_{HTK} алкинов.

Так, например, для расчета теплот испарения при нормальной температуре кипения L_{HTK} алкинов численные значения параметров схемы (2) найдены методом наименьших квадратов (мнк) следующими, (в кДж/моль): $p_{nC} = 0,48$; $p_{\chi} = 8,20$.

Б) Построим топологический индекс Δi^3 , учитывающий влияние первого окружения по атомам в молекуле алкина:

$$\Delta i^3 = i^3 n_{\equiv CH} + i^3 n_{\equiv C - C^* -} + \sum_{i=1}^4 i^3 n_{-C^* -} + \sum_{i=1}^4 i^3 n_{-C -}. \quad (3)$$

Здесь $n_{\equiv CH}$, $n_{\equiv C - C^* -}$, $n_{-C^* -}$, $n_{-C -}$ – числа валентных взаимодействий атомов C в молекуле алкина. Эти числа могут быть выражены через числа соответствующих фрагментов $\equiv C_i H$, $\equiv C_i - C^* -$, $-C_i^* -$, $-C_i -$ в молекуле алкина.

**Физико-химические аспекты изучения кластеров,
наноструктур и наноматериалов**

Таблица 1. Опытные [10] и рассчитанные по (2) и (4) значения теплот испарения при нормальной температуре кипения L_{HTK} алкинов $C_2H_2 - C_9H_{16}$, кДж/моль

Молекула алкина	nC	ТИ χ	ТИ Δi^3	L_{HTK} , кДж/моль		
				Опыт [10]	Расчет (2)	Расчет (4)
Acetylene	2	1,00	2	11,520	9,17	11,52
MethylAcetylene	3	1,41	3	22,247	13,01	22,25
1-Butyne	4	1,91	4	26,43	17,60	24,52
2-Butyne	4	1,91	11	24,522	17,60	26,43
1-Pentyne	5	2,41	19	27,316	22,18	27,32
2-Pentyne	5	2,41	12	29,246	22,18	29,25
3-methyl-1-butyne	5	2,27	31	26,02	21,03	26,02
3,3-Dimethyl-1-butyne	6	2,91	27	25,479	26,76	30,45
1-hexyne	6	2,91	20	30,446	26,76	30,91
2-hexyne	6	2,91	20	30,911	26,76	30,37
3-hexyne	6	2,81	39	30,369	25,94	27,70
3-methyl-1-pentyne	6	2,77	39	27,7	25,61	28,01
4-methyl-1-pentyne	6	2,77	32	28,005	25,61	28,91
4-methyl-2-pentyne	6	2,56	69	28,91	23,89	25,48
1-heptyne	7	3,41	35	31,878	31,35	31,88
2-heptyne	7	3,41	28	32,775	31,35	32,78
3-heptyne	7	3,41	28	32,343	31,35	32,34
3-methyl-1-hexyne	7	3,31	47	30,261	30,53	30,26
4-methyl-1-hexyne	7	3,31	47	30,793	30,53	30,79
5-methyl-1-hexyne	7	3,27	47	30,869	30,20	30,87
4-methyl-2-hexyne	7	3,31	40	31,387	30,53	31,39
5-methyl-2-hexyne	7	3,27	40	31,645	30,20	31,65
2-methyl-3-hexyne	7	3,27	40	31,004	30,20	31,00
3-ethyl-1-pentyne	7	3,35	47	30,173	30,85	30,17
3,3-dimethyl-1-pentyne	7	3,12	77	28,405	28,97	28,41
3,4-dimethyl-1-pentyne	7	3,06	77	29,558	28,47	28,93
4,4-dimethyl-1-pentyne	7	3,18	59	28,934	29,46	29,56
4,4-dimethyl-2-pentyne	7	3,06	70	29,387	28,47	29,39
1-octyne	8	3,91	43	35,314	35,93	35,31
2-octyne	8	3,91	36	35,275	35,93	35,28
3-octyne	8	3,91	36	34,862	35,93	34,86
4-octyne	8	3,91	36	35,115	35,93	35,12
3-ethyl-3-methyl-1-pentyne	8	3,68	85	27,003	34,04	27,00
1-nonyne	9	4,41	51	37,12	40,51	37,12
2-nonyne	9	4,41	44	37,68	40,51	37,68
3-nonyne	9	4,41	44	37,245	40,51	37,25
4-nonyne	9	4,41	44	36,486	40,51	36,49
7-methyl-3-octyne	9	4,27	56	34,582	39,36	34,58
2,6-dimethyl-3-heptyne	9	4,13	68	29,856	38,22	29,86
5,5-dimethyl-3-heptyne	9	4,12	86	34,582	38,13	34,58

Физико-химическое свойство $P_{C_nH_{2n-2}}$ запишем в виде:

$$P_{C_nH_{2n-2}} = p_{nC} \cdot a + p_{\Delta} \cdot b, \quad (4)$$

где $a = nC$, $b = \Delta i^3$ – коэффициенты схемы (2), а p_{nC}, p_{Δ} – параметры схемы (4), найденные методом наименьших квадратов по отобраным экспериментальным данным [10] для теплот испарения при нормальной температуре кипения L_{HTK} алкинов.

Так, например, для расчета теплот испарения при нормальной температуре кипения L_{HTK} алкинов численные значения параметров схемы (2) найдены методом наименьших квадратов (мнк) следующими: $p_{nC} = 5,31$ кДж/моль; $p_{\Delta} = -0,15$ кДж/моль.

С использованием полученных в работе ТИ Рандича χ и Δi^3 для алкинов проведены численные расчеты теплот испарения при нормальной температуре кипения L_{HTK} алкинов, не изученных экспериментально и необходимых для практического использования. Представленные опытные и рассчитанные значения свойства L_{HTK} алкинов представлены в Таблицах 1 и 2.

Статистические характеристики для L_{HTK} алкинов схем (2) и (4), соответственно, найдены следующими: N число реперных данных – 40, r – коэффициент корреляции: 0,897 и 0,936; $|\varepsilon|$ – средне-абсолютное отклонение: 2,89 и 2,45 (кДж/моль); ε_{\max} – максимальное отклонение: 9,24 в точке $(CH_3)-C \equiv CH$ и 7,57 в точке $CH_3CH(CH_3)-C \equiv C-CH_2(CH_3)_2$ (кДж/моль).

Таблица 2. Рассчитанные по (2) и (4) значения теплот испарения при нормальной температуре кипения L_{HTK} 72 алкинов C_9H_{16} , не изученных экспериментально, кДж/моль

Молекула алкина	ТИ χ	ТИ Δi^3	L_{HTK} , кДж/моль	
			Расчет (2)	Расчет (4)
1	2	3	4	5
HC≡C-(CH ₂) ₆ CH ₃ *	4,41	51	40,51	40,03
CH ₃ -C≡C-(CH ₂) ₅ CH ₃ *	4,41	44	40,51	41,10
CH ₃ (CH ₂)-C≡C-(CH ₂) ₄ CH ₃ *	4,41	44	40,51	41,10
CH ₃ (CH ₂) ₂ -C≡C-(CH ₂) ₃ CH ₃ *	4,41	44	40,51	41,10
HC≡C-CH(изоC ₃ H ₇)(nC ₃ H ₇)	4,22	75	38,95	36,36
HC≡C-CH(CH ₃)(CH ₂) ₄ CH ₃	4,31	63	39,69	38,19
HC≡C-CH ₂ CH ₂ (CH ₃)(CH ₂) ₃ CH ₃	4,31	63	39,69	38,19
HC≡C-(CH ₂) ₂ CH ₂ (CH ₃)(CH ₂) ₂ CH ₃	4,31	63	39,69	38,19
HC≡C-(CH ₂) ₃ CH ₂ (CH ₃)(CH ₂)CH ₃	4,31	63	39,69	38,19
HC≡C-(CH ₂) ₄ CH ₂ (CH ₃) ₂	4,27	63	39,36	38,19
CH ₃ -C≡C-CH(CH ₃)(CH ₂) ₃ CH ₃	4,31	56	39,69	39,26

**Физико-химические аспекты изучения кластеров,
наноструктур и наноматериалов**

Продолжение Таблицы 2

1	2	3	4	5
$\text{CH}_3\text{-C}\equiv\text{C-CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	4,31	56	39,69	39,26
$\text{CH}_3\text{-C}\equiv\text{C-(CH}_2)_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_3$	4,31	56	39,69	39,26
$\text{CH}_3\text{-C}\equiv\text{C-(CH}_2)_3\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	4,27	56	39,36	39,26
$\text{CH}_3(\text{CH}_2)\text{-C}\equiv\text{C-CH}(\text{CH}_3)(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	4,31	56	39,69	39,26
$\text{CH}_3(\text{CH}_2)\text{-C}\equiv\text{C-CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_3$	4,31	56	39,69	39,26
$\text{CH}_3(\text{CH}_2)\text{-C}\equiv\text{C-(CH}_2)_2\text{CH}(\text{CH}_3)_2^*$	4,27	56	39,36	39,26
$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{-C}\equiv\text{C-(CH}_2)_2\text{CH}_3$	4,31	56	39,69	39,26
$\text{CH}_3\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{-C}\equiv\text{C-(CH}_2)_2\text{CH}_3$	4,27	56	39,36	39,26
$\text{HC}\equiv\text{C-CH}(\text{CH}_3)\text{CH}(\text{CH}_3)(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	4,22	75	38,95	36,36
$\text{HC}\equiv\text{C-CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_3$	4,20	75	38,79	36,36
$\text{HC}\equiv\text{C-CH}(\text{CH}_3)(\text{CH}_2)_2\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	4,16	75	38,46	36,36
$\text{HC}\equiv\text{C-CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_3$	4,22	75	38,95	36,36
$\text{HC}\equiv\text{C-CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	4,16	75	38,46	36,36
$\text{HC}\equiv\text{C-(CH}_2)_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	4,18	75	38,63	36,36
$\text{CH}_3\text{-C}\equiv\text{C-CH}(\text{CH}_3)\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_3$	4,22	68	38,95	37,43
$\text{CH}_3\text{-C}\equiv\text{C-CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	4,16	68	38,46	37,43
$\text{CH}_3\text{-C}\equiv\text{C-CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	4,18	68	38,63	37,43
$\text{CH}_3(\text{CH}_2)\text{-C}\equiv\text{C-CH}(\text{CH}_3)\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	4,18	68	38,63	37,43
$\text{CH}_3\text{CH}(\text{CH}_3)\text{-C}\equiv\text{C-CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_3$	4,16	68	38,46	37,43
$\text{CH}_3\text{CH}(\text{CH}_3)\text{-C}\equiv\text{C-CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)_2^*$	4,13	68	38,22	37,43
$\text{HC}\equiv\text{C-C}(\text{CH}_3)_2(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	4,12	93	38,13	33,60
$\text{HC}\equiv\text{C-CH}_2\text{C}(\text{CH}_3)_2(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	4,12	93	38,13	33,60
$\text{HC}\equiv\text{C-(CH}_2)_2\text{C}(\text{CH}_3)_2\text{CH}_2\text{CH}_3$	4,12	93	38,13	33,60
$\text{HC}\equiv\text{C-(CH}_2)_3\text{C}(\text{CH}_3)_3$	4,06	93	37,64	33,60
$\text{CH}_3\text{-C}\equiv\text{C-C}(\text{CH}_3)_2(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	4,12	86	38,13	34,68
$\text{CH}_3\text{-C}\equiv\text{C-CH}_2\text{C}(\text{CH}_3)_2\text{CH}_2\text{CH}_3$	4,12	86	38,13	34,68
$\text{CH}_3\text{-C}\equiv\text{C-(CH}_2)_2\text{C}(\text{CH}_3)_3$	4,06	86	37,64	34,68
$\text{CH}_3(\text{CH}_2)\text{-C}\equiv\text{C-C}(\text{CH}_3)_2\text{CH}_2\text{CH}_3^*$	4,12	86	38,13	34,68
$\text{C}(\text{CH}_3)_3\text{-C}\equiv\text{C-(CH}_2)_2\text{CH}_3$	4,06	86	37,64	34,68
$\text{CH}_3(\text{CH}_2)\text{-C}\equiv\text{C-CH}_2\text{C}(\text{CH}_3)_3$	4,06	86	37,64	34,68
$\text{HC}\equiv\text{C-CH}(\text{CH}_3)\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	4,09	87	37,89	34,52
$\text{HC}\equiv\text{C-C}(\text{CH}_3)_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_3$	4,04	105	37,48	31,77
$\text{HC}\equiv\text{C-C}(\text{CH}_3)_2\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	3,98	105	36,99	31,77
$\text{HC}\equiv\text{C-CH}(\text{CH}_3)\text{C}(\text{CH}_3)_2\text{CH}_2\text{CH}_3$	4,04	105	37,48	31,77
$\text{HC}\equiv\text{C-CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{C}(\text{CH}_3)_3$	3,95	105	36,74	31,77
$\text{HC}\equiv\text{C-CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{C}(\text{CH}_3)_3$	3,98	105	36,99	31,77
$\text{HC}\equiv\text{C-CH}_2\text{C}(\text{CH}_3)_2\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	4,00	105	37,15	31,77
$\text{CH}_3\text{-C}\equiv\text{C-C}(\text{CH}_3)_2\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	4,00	98	37,15	32,84

Продолжение Таблицы 2

1	2	3	4	5
$\text{CH}_3\text{-C}\equiv\text{C-CH}(\text{CH}_3)\text{C}(\text{CH}_3)_3$	3,98	98	36,99	32,84
$\text{C}(\text{CH}_3)_3\text{-C}\equiv\text{C-CH}(\text{CH}_3)_2$	3,92	98	36,49	32,84
$\text{HC}\equiv\text{C-C}(\text{CH}_3)_2\text{C}(\text{CH}_3)_3$	3,81	135	35,59	27,18
$\text{HC}\equiv\text{C-C}(\text{CH}_3)(\text{C}_2\text{H}_5)(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	4,18	93	38,63	33,60
$\text{HC}\equiv\text{C-CH}(\text{C}_2\text{H}_5)\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_3$	4,26	75	39,28	36,36
$\text{HC}\equiv\text{C-CH}(\text{C}_2\text{H}_5)\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	4,20	75	38,79	36,36
$\text{HC}\equiv\text{C-CH}(\text{CH}_3)\text{CH}(\text{C}_2\text{H}_5)\text{CH}_2\text{CH}_3$	4,26	75	39,28	36,36
$\text{HC}\equiv\text{C-CH}(\text{HC}_2\text{H}_5)\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$	4,35	63	40,02	38,19
$\text{HC}\equiv\text{C-CH}_2\text{C}(\text{CH}_3)(\text{C}_2\text{H}_5)\text{CH}_2\text{CH}_3$	4,18	93	38,63	33,60
$\text{HC}\equiv\text{C-CH}_2\text{CH}(\text{C}_2\text{H}_5)\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	4,22	75	38,95	36,36
$\text{HC}\equiv\text{C-CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}(\text{C}_2\text{H}_5)_2\text{CH}_3$	4,22	86	38,95	34,68
$\text{HC}\equiv\text{C-CH}_2\text{CH}(\text{HC}_2\text{H}_5)\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$	4,35	63	40,02	38,19
$\text{CH}_3\text{-C}\equiv\text{C-C}(\text{C}_2\text{H}_5)(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_3$	4,18	86	38,63	34,68
$\text{CH}_3\text{-C}\equiv\text{C-CH}(\text{C}_2\text{H}_5)\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	4,22	68	38,95	37,43
$\text{HC}\equiv\text{C-CH}_2\text{CH}_2\text{CH}(\text{HC}_2\text{H}_5)\text{CH}_2\text{CH}_3$	4,35	63	40,02	38,19
$\text{CH}_3\text{-C}\equiv\text{C-CH}(\text{C}_2\text{H}_5)\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$	4,35	56	40,02	39,26
$\text{CH}_3\text{-C}\equiv\text{C-CH}_2\text{CH}(\text{C}_2\text{H}_5)_2$	4,35	56	40,02	39,26
$\text{HC}\equiv\text{C-CH}(\text{изоC}_3\text{H}_7)_2$	4,09	87	37,89	34,52
$\text{HC}\equiv\text{C-CH}(\text{C}_2\text{H}_5)\text{C}(\text{CH}_3)_3$	4,02	105	37,31	31,77
$\text{HC}\equiv\text{C-CH}(\text{HC}_3\text{H}_7)_2$	4,35	63	40,02	38,19
$\text{HC}\equiv\text{C-C}(\text{C}_2\text{H}_5)_2\text{CH}_2\text{CH}_3$	4,24	93	39,12	33,60
$\text{HC}\equiv\text{C-CH}(\text{C}_2\text{H}_5)\text{CH}(\text{C}_2\text{H}_5)(\text{CH}_3)$	4,26	75	39,28	36,36
$\text{HC}\equiv\text{C-C}(\text{C}_2\text{H}_5)(\text{C}_3\text{H}_7)(\text{CH}_3)$	4,06	105	37,64	31,77

Корреляционные зависимости «структура – теплота испарения при нормальной температуре кипения L_{HTK} алкинов $\text{C}_2\text{H}_2 - \text{C}_9\text{H}_{16}$ ».

Рассмотрим графические зависимости «структура – теплота испарения при нормальной температуре кипения L_{HTK} алкинов $\text{C}_2\text{H}_2 - \text{C}_9\text{H}_{16}$ » и способы их аналитического представления (рис. 1, 2). Точки на рисунках (экспериментальные и рассчитанные значения свойства, соответствующие значению индексов, отражающих структуру молекул) указывают на общий характер зависимостей.

Для сравнения на рис. 1 и 2 представлены две зависимости: 1) опытные значения теплот испарения при нормальной температуре кипения L_{HTK} алкинов (кДж/моль) от топологического индекса χ Рандича и индекса Δi^3 ; 2) рассчитанные значения L_{HTK} (кДж/моль) алкинов от ТИ χ Рандича и индекс Δi^3 .

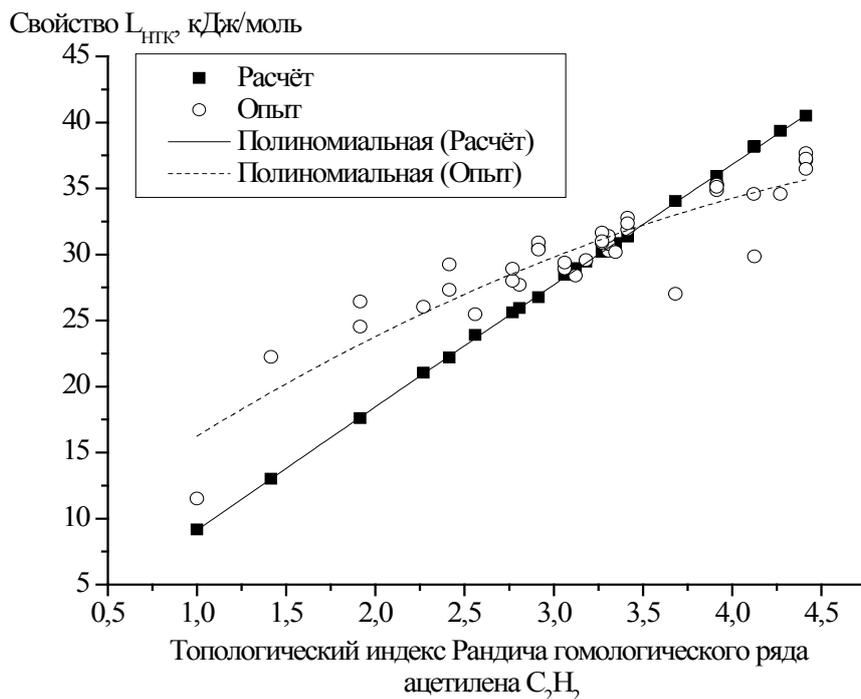


Рис. 1. Зависимость опытных и рассчитанных величин L_{HTK} алкинов $C_2H_2 - C_9H_{16}$ от ТИ Рандича (1).

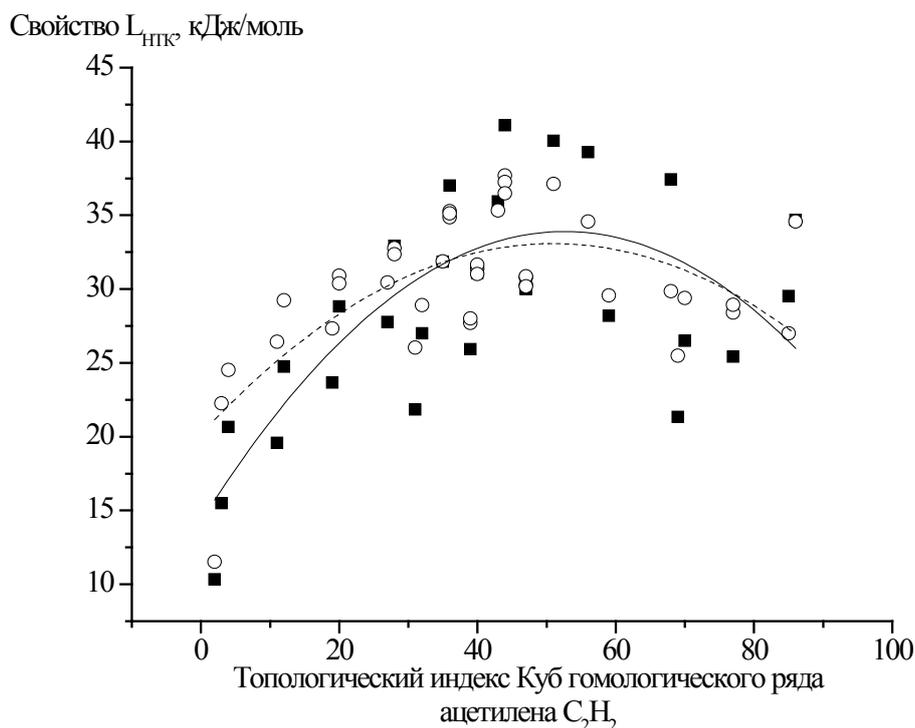


Рис. 2. Зависимость опытных и рассчитанных величин L_{HTK} алкинов $C_2H_2 - C_9H_{16}$ от ТИ Δi^3 (3).

Как видно из рис. 1 и 2, ТИ χ Рандича и индекс Δi^3 хорошо воспроизводят зависимости теплот испарения при нормальной температуре кипения L_{HTK} алкинов и, по-видимому, такой подход можно

использовать для предварительного прогнозирования свойств веществ не изученных экспериментально. Нами проведено критическое сопоставление разных (независимых) ТИ для алкинов в плане их пригодности для описания структуры химических соединений и построения количественных соотношений со свойствами, предложены новые ТИ, обладающие хорошей дискриминирующей способностью. Раскрыта роль топологических индексов в построении аддитивных схем расчета и прогнозирования в ряде алкинов. Показано, что представленные ТИ участвуют в прогнозировании, что позволяет достаточно хорошо различать структурные изомеры и добиться приемлемого согласия с экспериментом.

Библиографический список:

1. **Станкевич, И.В.** Графы в структурной химии / И.В. Станкевич. В кн.: Применение графов в химии; под ред. Н.С. Зефилова, С.И. Кучанова. – Новосибирск: Наука, 1988. – С. 7-69.
2. **Смоленский, Е.А.** Применение теории графов к расчетам структурно-аддитивных свойств углеводородов / Е.А. Смоленский // Журнал физической химии. – 1964. – Т. 38. – № 5. – С. 1288-1290.
3. **Зефилов, Н.С.** Применение теории графов в химии / под ред. Н.С. Зефилова, С.И. Кучанова. – Новосибирск: Наука, 1988. – 307 с.
4. **Кинг, Р.** Химические приложения топологии и теории графов / под ред. Р. Кинга; пер. с англ. – М.: Мир, 1987. – 560 с.
5. **Баскин, И.И.** Многослойные персептроны в исследовании зависимостей «структура-свойство» для органических соединений / И.И. Баскин, В.А. Палюлин, Н.С. Зефилов // Российский химический журнал. – 2006. – Т. 1. – № 2. – С. 86-92.
6. **Степанов, Н.Ф.** Методы линейной алгебры в физической химии / Н.Ф. Степанов, Н.Е. Ерлыкина, Г.Г. Филиппов. – М.: МГУ, 1976. – 300 с.
7. **Доди, Ж.-П.** Эмпирическое и теоретическое разбиение молекулярной энергии на локальные вклады. Аддитивность и конформационные проблемы / Ж.-П. Доди, О. Рожа. В кн.: Локализация и делокализация в квантовой химии: атомы и молекулы в основном состоянии; пер. с англ. под ред. Г.М. Жидомирова. – М.: Мир, 1978. – С. 179-240.
8. **Гребешков, В.В.** Количественные корреляции «структура алкинов – теплота испарения» / В.В. Гребешков, В.М. Смоляков // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов: межвуз. сб. науч. тр. / под общей редакцией В.М. Самсонова, Н.Ю. Сдобнякова. – Тверь: Твер. гос. ун-т, 2013. – Вып. 5. – С. 67-72.
9. **Смоляков, В.М.** Термохимические расчеты: учебное пособие / В.М. Смоляков, Ю.Г. Папулов, В.П. Левин. – Тверь: Изд-во ТвГУ, 1991. – 78 с.
10. **Yaws, C.L.** Thermophysical properties of chemicals and hydrocarbons / C.L. Yaws. – William Andrew Inc., 2008. – 800 p.