

нако, на сегодняшний день, соединения, которые были проверены на антигликимическую активность, а это неорганические соли - ванадил сульфат и некоторые метаванадаты, не только не оказывают необходимого эффекта, но и обладают высокой токсичностью. Одним из наиболее простых и эффективных путей снижения токсичности является изменение лигандного окружения атома-комплексообразователя.

Целью нашей работы является синтез и оценка кристаллической структуры комплексов ванадия в зависимости от условий синтеза(природы катиона и лигандного окружения ).

В результате взаимодействия малата бария, карбоната цезия и фенантролинового комплекса ванадил сульфата, синтезированного по методике[2], были получены синие кристаллические пластинки (комплекс (I)). По аналогичной методике, но с гидроксидом калия, были получены оранжевые ромбы (комплекс(II)). После проведенных физико-химических исследований (рентгеноструктурный, ИК, элементный анализ) получены результаты, говорящие о схожести строения комплексов.

1. Tracey A.S., Willsky G.R., Takeuchi E.S. Vanadium: Chemistry, Biochemistry, Pharmacology and Practical Applications. NY. :CRC Press.2007.223p.

2. Dong, Y., Narla, R.K., Sudbeck, E., Uckun, F.M. X-ray structure, and anti-leukemic activity of oxovanadium(IV) complexes. // J. Inorg. Biochem. 2000. V.78. p.321-330.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки.*

## **АДДИТИВНАЯ СХЕМА РАСЧЕТА СВОЙСТВ X-ЗАМЕЩЕННЫХ РАДИКАЛОВ $\text{CH}_3\text{-C}^*\text{H}_2$ НА ОСНОВЕ РАЗБИЕНИЯ ТРЕУГОЛЬНЫХ ЧИСЕЛ**

*Барина М.Н., Нилов Д.Ю.*

Тверской государственный университет  
170100, г. Тверь, ул. Желябова, д. 33  
smolyakov@inbox.ru

По аддитивной схеме проведен расчет энтальпий образования алкильных монадиалов как X-замещенных  $\text{CX}_k\text{H}_{3-k}\text{-C}^*\text{X}_l\text{H}_{2-l}$ , где X=  $\text{CH}_3$  – одновалентные заместители, а k, l - число соответствующих заместителей у атома C или  $\text{C}^*$  соответственно. В парном приближении через один и через два атома по цепи молекулы (без учета поворотной изомерии) имеет вид:

$$P(\text{CX}_k\text{H}_{3-k}\text{-C}^*\text{X}_l\text{H}_{2-l}) = a_0 p_0 + a_1 p_1 + a_2 p_2 + a_3 p_3 + a_4 p_4 + a_5 p_5, \quad (1)$$

где  $a_0 = 1$ ,  $a_1, a_2, \dots$  – коэффициенты схемы, из которых  $a_1, a_2$  – результат разбиения натурального числа;  $a_3, a_4, a_5$  – результат разбиения треугольного числа  $K_3 = n(n-1)/2$ , где  $n = 1, 2, 3, \dots$ ;  $p_0, p_1, p_2, \dots$  – параметры, определяемые мнк для свойства Р ряда Х-замещенных молекулы этильного монорадикала. В таблице 1 приведены коэффициенты аддитивной схемы (1).

Так, например, для расчета  $\Delta_f H^0_{298,16, \text{газ}}$  Х-замещенных этильных монорадикалов численные значения параметров схемы (1) найдены мнк по опытным данным [1] следующими, (в кДж/моль):  $p_0 = 122,38$ ;  $p_1 = -32,19$ ;  $p_2 = -29,08$ ;  $p_3 = 15,79$ ;  $p_4 = 9,12$ ;  $p_5 = -1,14$ ; статистические характеристики (в кДж/моль): максимальное отклонение – 8,03; среднее абсолютное – 3,06. Проведены численные расчеты энтальпии образования  $\Delta_f H^0_{298,16, \text{газ}}$  алкильных монорадикалов (как Х-замещенных молекулы этильного монорадикала  $\text{CH}_3\text{-C}^*\text{H}_2$ ), не изученных экспериментально (см. табл. 2).

Таблица 1. Исходная схема (1) оценки свойств Х-замещенных этильных монорадикалов ( $X = \text{CH}_3$ ).

Х зам. этанола	$a_0$	n		$K_3$		
		$a_1$	$a_2$	$a_3$	$a_4$	$a_5$
$\text{CH}_3\text{-C}^*\text{H}_2$	1	0	0	0	0	0
$\text{CH}_3\text{-C}^*\text{HX}$	1	1	0	0	0	0
$\text{CH}_2\text{X-C}^*\text{H}_2$	1	0	1	0	0	0
$\text{CH}_3\text{-C}^*\text{X}_2$	1	2	0	1	0	0
$\text{CH}_2\text{X-C}^*\text{HX}$	1	1	1	0	1	0
$\text{CHX}_2\text{-C}^*\text{H}_2$	1	0	2	0	0	1
$\text{CH}_2\text{X-C}^*\text{X}_2$	1	2	1	1	2	0
$\text{CHX}_2\text{-C}^*\text{HX}$	1	1	2	0	2	1
$\text{CX}_3\text{-C}^*\text{H}_2$	1	0	3	0	0	3
$\text{CHX}_2\text{-C}^*\text{X}_2$	1	2	2	1	4	1
$\text{CX}_3\text{-C}^*\text{HX}$	1	1	3	0	3	3
$\text{CX}_3\text{-C}^*\text{X}_2$	1	2	3	1	6	3

Таблица 2. Рассчитанные по (1) значения  $\Delta_f H^0_{298, \text{К,газ}}$  Х-замещенных этильного монорадикала ( $X = \text{CH}_3$ ), в кДж/моль.

Молекула	Расчет	Откл.	Молекула	Расчет	Откл.
$\text{CH}_3\text{-C}^*\text{H}_2$	122,3765	-2,6765	$\text{CH}_2\text{X-C}^*\text{X}_2$	62,936	-
$\text{CH}_3\text{-C}^*\text{HX}$	90,19	0	$\text{CHX}_2\text{-C}^*\text{HX}$	49,115	-
$\text{CH}_2\text{X-C}^*\text{H}_2$	93,2905	8,0295	$\text{CX}_3\text{-C}^*\text{H}_2$	31,7135	2,6765
$\text{CH}_3\text{-C}^*\text{X}_2$	73,79	0	$\text{CHX}_2\text{-C}^*\text{X}_2$	50,947	-

CH <sub>2</sub> X-C*NX	70,22	0	CX <sub>3</sub> -C*NX	26,875	-
CNХ <sub>2</sub> -C*NН <sub>2</sub>	63,0695	-8,0295	CX <sub>3</sub> -C*X <sub>2</sub>	37,823	-

Результаты расчета  $\Delta_f H_{298,16, \text{газ}}^0$  алкильных монорадикалов хорошо согласуются с экспериментальными данными.

1. Ю.Д. Орлов, Ю.А. Лебедев, И.Ш.Сайфулин. Термохимия органических свободных радикалов // М., Наука. 2001, 304 с.

## СХЕМА ОЦЕНКИ СВОЙСТВ АЛКАНОВ С ТОПОЛОГИЧЕСКИМ ИНДЕКСОМ, УЧИТЫВАЮЩИМ ПЕРВОЕ ОКРУЖЕНИЕ ПО С-С-СВЯЗЯМ

*Говенько И.С., Крутских В.С.*

Тверской государственный университет  
170100, г. Тверь, ул. Желябова, д. 33  
smolyakov@inbox.ru

Для построения корреляционных зависимостей «структура – энтальпия образования алкана» нами использованы следующие топологические индексы (ТИ):

$${}^1\chi = \sum_{i,j=1;i \leq j}^4 (v_i v_j)^{\frac{1}{2}}; \quad (1) \quad {}^2\chi = \sum_{j=2}^4 \sum_{i,m=1;i \leq m}^4 (v_i v_j v_m)^{\frac{1}{2}} \quad (2)$$

где  $v_i v_j$  - степень вершин, инцидентных ребру в молекулярном графе (МГ) алкана,  $v_i v_j v_m$  - произведение степеней вершин, имеющих общим концом вершину  $v_i$  в МГ алкана.

С учетом ТИ (1) и (2) аддитивная схема расчета свойства  $P_{C_n H_{2n+2}}$  имеет вид

$$P_{C_n H_{2n+2}} = a_0 p_0 + n p_1 + {}^1\chi \cdot p_2 + {}^2\chi \cdot p_3 \quad (3)$$

где  $p_0, p_1, p_2, p_3$  – параметры, определяемые методом наименьших квадратов (мнк) по известным опытным [1] величинам  $\Delta_f H_{298 \text{ К, газ}}^0$  ряда молекул алканов;  $a_0 = 1$ ,  $n$  - число вершин. Так для расчета  $\Delta_f H_{298 \text{ К, газ}}^0$  35 нонанов численные значения параметров схемы (3) найдены мнк следующими, (в кДж/моль):  $p_0 = -50,88$ ;  $p_1 = -23,091$ ,  $p_2 = 9,921$ ,  $p_3 = -5,449$ ;  $N = 46$ ,  $|\epsilon| = 2,47$ ,  $\epsilon_{\text{max}} = 8,83$  (для 2,2,4,4m5). Результаты прогноза  $\Delta_f H_{298 \text{ К, газ}}^0$  некоторых нонанов и отклонения  $\Delta$  (опыт – расчет) по (3), представлены в таблице.