

Прогнозирование критических свойств и теплоемкости углеводородов по топологическим характеристикам их молекул

Аубекеров Тимур Мендбайулы

Коледин Олег Сергеевич

Уфимский государственный нефтяной технический университет

Доломатов Михаил Юрьевич, д.х.н.

timur_1995@inbox.ru

Оценка физико-химических свойств углеводородов таких как молярная теплоемкость, критические параметры необходима для проведения проектных расчетов в химической технологии для решения научных задач. В настоящее время известен ряд способов расчета физико-химических свойств. Одним из них является метод определения физико-химических свойств углеводородов на основе молярной массы и критических параметров [1]. Однако недостатком метода является сложность расчета и ограничение точности в рядах изомеров. Также известен способ определения физико-химических свойств по потенциалам ионизации [2]. Недостатком такого способа является его ограниченность и применимость к узким рядам соединений.

Целью данной работы является разработка методики, позволяющей использовать теорию графов, с устранением перечисленных недостатков. Объектами исследования являются алканы, арены и алкены. В качестве топологических параметров [3] используется индекса Винера, индекс Рандича и функция от собственных значений топологической матрицы и индекса, учитывающий цис- и трансизомерию у алкенов. В качестве характеристики физико-химических свойств рассматривалась модель вида:

$$\Phi = \Phi(W, \rho, L, I) \quad (1)$$

где Φ – рассчитываемое физико-химическое свойство углеводорода;

W – индекс Винера;

L – сумма квадратов собственных значений топологической матрицы;

ρ – индекс Рандича;

I – индекс, учитывающий цис- и трансизомерию у алкенов.

Коэффициенты модели (1) были найдены методами многофакторного регрессионного анализа [2,3]. Точность полученных моделей в QSPR подходе оценивалась с помощью статистических характеристик, анализ показал, что полученная модель является адекватной. Вычисленная множественная корреляция превышает 0,97, что подтверждает сильную связь между топологическими индексами и физико-химическими свойствами углеводородов.

На языке программирования Maple 9 разработана соответствующая программа расчета некоторых топологических индексов и некоторых физико-химических свойств углеводородов, которая может быть использована в инженерных и научных расчетах.

Список публикаций:

[1] Ахметов, С.А., Гостенова Н.А. // Практикум по инженерным расчетам физико-химических свойств углеводородных систем. Уфа: Изд-во УГНТУ. 2006. С. 148.

[2] Дезорцев, С.В., Доломатов М.Ю., Шуткова С.А. // Башкирский химический журнал. 2012. Т. 19. № 2. С. 85.

[3] Станкевич М.И., Станкевич И.В., Зефирова Н.С. // Успехи химии. 1988. Т. 57. №3. С. 337.

Квантово-химические расчеты для исследования многослойных наноразмерных органических систем

Байбулова Галия Шафкатовна

Калимуллина Луиза Раяновна, Лачинов Алексей Николаевич

Башкирский государственный педагогический университет им. М. Акмуллы

Лачинов Алексей Николаевич, д.ф.-м.н.

102galiya102@rambler.ru

Для прогнозирования свойств полимерных материалов и возможности их конкретного практического использования недостаточно знания о химической структуре, необходимы также знания об электронной структуре полимера.

В тонких пленках полиариленов при инъекции носителей заряда из электродов было обнаружено множество эффектов, связанных с переключением проводимости пленок из низкопроводящего состояния в