

О СВЯЗИ ДИНАМИЧЕСКОЙ ВЯЗКОСТИ НАФТЕНОВЫХ УГЛЕВОДОРОДОВ РЯДА ЦИКЛОПЕНТАНА С КВАНТОВЫМИ И СТРУКТУРНЫМИ ПАРАМЕТРАМИ

Э.А. Ковалева, М.Ю. Доломатов

Элла Александровна Ковалева*

Кафедра математики, Уфимский государственный нефтяной технический университет, ул. Космонавтов, 1, Уфа, Российская Федерация, 450062

E-mail: kovaleva-ugntu@yandex.ru*

Михаил Юрьевич Доломатов

Кафедра физической электроники и нанофизики, Физико-технический институт Башкирского государственного университета, ул. З.Валиди, 32, Уфа, Российская Федерация, 450074

E-mail: mdolomatov@bk.ru

Рассмотрена взаимосвязь параметров вязкого течения ньютоновской жидкости моноциклических углеводородов с квантовыми и структурными (топологическими) характеристиками молекул. В качестве квантовых и топологических характеристик рассмотрены потенциалы ионизации и топологические индексы, соответственно. Вертикальные потенциалы ионизации рассчитывали по теореме Купманса квантово-химическими методами с полной оптимизацией геометрии молекул. В качестве топологических индексов, учитывающих размеры и форму графа, были исследованы индекс Винера, центрический индекс Балабана, индексы Рандича (индекс молекулярной связности), Гутмана (Сцегеда), Платта и Харари. Для углеводородов ряда циклопентана с боковыми цепями установлен кинетический компенсационный эффект динамической вязкости, который связывает энергию активации и предэкспоненту Аррениуса в рамках модели Френкеля-Эйринга. Установлено, что для соединений рядов пятичленных нафтенев кажущаяся энергия активации вязкого течения и связанная с ней предэкспонента Аррениуса зависят от квантовых параметров (потенциалов ионизации) и топологии молекул. В работе предложена регрессионная модель QSPR «структура-свойство», использующая в качестве дескрипторов для прогноза динамической вязкости потенциалы ионизации и топологические индексы. Для проверки прогностических возможностей предложенной модели и адекватности прогноза рассчитана динамическая вязкость углеводородов, не входящих в базовый ряд. Дано экспериментальное и теоретическое обоснование предложенной закономерности в рамках представления об энергии активации вязкого течения как меры межмолекулярного взаимодействия и преобладания дисперсионного взаимодействия в молекулах углеводородов ряда циклопентана. Полученное в ходе исследования уравнение может быть использовано для прогнозирования вязкостных характеристик синтезированных и природных пятичленных нафтенев.

Ключевые слова: углеводороды ряда циклопентана, динамическая вязкость, потенциалы ионизации, топологические индексы, кинетический компенсационный эффект, энергия активации вязкого течения, межмолекулярное взаимодействие

Для цитирования:

Ковалева Э.А., Доломатов М.Ю. О связи динамической вязкости нафтенев углеводородов ряда циклопентана с квантовыми и структурными параметрами. *Изв. вузов. Химия и хим. технология.* 2020. Т. 63. Вып. 4. С. 34–41

For citation:

Kovaleva E.A., Dolomatov M.Yu. Dependence of dynamic viscosity of naphthenic hydrocarbons in cyclopentane series on quantum and structural parameters. *Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved. Khim. Khim. Tekhnol.* [Russ. J. Chem. & Chem. Tech.]. 2020. V. 63. N 4. P. 34–41

DEPENDENCE OF DYNAMIC VISCOSITY OF NAPHTHENIC HYDROCARBONS IN CYCLOPENTANE SERIES ON QUANTUM AND STRUCTURAL PARAMETERS

E.A. Kovaleva, M.Yu. Dolomatov

Ella A. Kovaleva*

Department of Mathematics, Faculty of General Scientific Disciplines, Ufa State Petroleum Technological University, Kosmonavtov st., 1, Ufa, 450062, Russia
E-mail: kovaleva-ugntu@yandex.ru*

Mikhail Yu. Dolomatov

Department of Physical Electronics and Nanophysics, Institute of Physics and Technology, Bashkir State University, Zaki Validi st., 32, Ufa, 450074, Russia
E-mail: mdolomatov@bk.ru

Interrelation of parameters for Newtonian fluid viscous flow of monocyclic hydrocarbons with quantum and structural (topological) characteristics of molecules are considered. Ionization potentials and topological indices, respectively, were considered as quantum and topological characteristics. The vertical ionization potentials were calculated by the Koopmans' theorem of quantum chemical methods with full molecular geometry optimization. We have studied topological indices that take into account the size and shape of the molecular graph. As a topological descriptors the Wiener index, the Balaban centric index, the Randic index (the index of molecular connectivity), Gutman (Szeged) index, Platt index and the Harary index were considered. For hydrocarbons in cyclopentane series with side chains, the kinetic compensation effect of dynamic viscosity has been established, which connects the activation energy and Arrhenius factor in the framework of the Frenkel-Eyring model. It is established that for compounds of a number of five-membered naphthenes, the apparent activation energy for viscous flow and the associated pre-exponential factor, depends on quantum parameters (ionization potentials) and the topology of the molecules. In this paper, a regression quantitative structure–property relationship (QSPR) is proposed using as descriptors the ionization potentials and topological indices for the prediction of dynamic viscosity. Prognostics capabilities of the proposed model and the adequacy of the forecast were verified by calculating the values of the dynamic viscosity of hydrocarbons that are not included in the base series. Experimental and theoretical substantiation of the proposed regularity was given within the framework of the representation of the viscous flow activation energy as a measure of intermolecular interaction and the predominance of dispersion interaction in hydrocarbon molecules for cyclopentane series. The equation obtained during the study can be used to predict the viscosity characteristics of synthesized and natural five-membered naphthenes.

Key words: cyclopentane series hydrocarbons, dynamic viscosity, ionization potentials, topological indices, kinetic compensation effect, viscous flow activation energy, intermolecular interaction

ВВЕДЕНИЕ

Вязкость является важнейшей физической характеристикой реальных жидкостей, к которым относится большинство углеводородных сред, в частности топлив, нефтей и продуктов их переработки. Как известно, нафтеновые углеводороды входят в состав большинства углеводородных фракций и во многом определяют их реологические свойства.

В данном исследовании рассмотрены углеводороды ряда циклопентана с боковыми цепями (табл. 1). В ранее проведенных исследованиях были установлены закономерности связи физико-химических свойств углеводородов с потенциа-

лами ионизации (ПИ) для полициклических углеводородов [1] и углеводородов ряда алканов [2]. Недостатком этих работ является их эмпирический характер и неприменимость обнаруженных закономерностей к циклоалканам. В работе [3] обнаружены зависимости, связывающие динамическую вязкость с ПИ и индексом Винера молекул алканов. Зависимость от ПИ была объяснена преобладающим вкладом дисперсионных сил в межмолекулярное взаимодействие.

Согласно теории Г. Эйринга [4, 5], в ньютоновской жидкости происходит активационное движение молекул. Молекула может проникнуть в соседний слой лишь при образовании в нем полости, достаточной для перескакивания туда молекулы. На образование полости (на «рыхление» жидкости)

расходуется так называемая энергия активации вязкого течения. Теория Эйринга позволяет описать температурную зависимость вязкости [5]

$$\eta = \left[\frac{hN}{V} \cdot \exp(-\Delta S^* R) \right] \cdot \exp(\Delta H / (RT)), \quad (1)$$

где η – динамическая вязкость, Па·с, h – постоянная Планка, $h = 6,63 \cdot 10^{-34}$ Дж·с, N – число Авогадро, $N = 6,022 \cdot 10^{23}$ моль⁻¹, V – мольный (молярный) объем, м³/моль; ΔS^* – энтропия, кДж/(моль·К), R – газовая постоянная, Дж/моль·К; ΔH – теплота активации процесса вязкого течения, кДж/моль, T – абсолютная температура, К.

Поскольку молярный объем изменяется незначительно в широком диапазоне температур, а величину ΔS^* принимают независимой от температуры, уравнение (1) можно переписать в виде формулы Аррениуса-Френкеля-Эйринга [6].

$$\eta = \eta_0 \cdot \exp(E_a / (R \cdot T)) \quad (2)$$

где η_0 – константа, которая в первом приближении не зависит от температуры T , Па·с, E_a – энергия активации вязкого течения, Дж/моль.

В соответствии с физическим смыслом энергии активации вязкого течения [7] как работы, необходимой для преодоления сил межмолекулярного взаимодействия, следует, что в жидкостях, молекулы которых обладают небольшим дипольным моментом, энергия межмолекулярного взаимодействия определяется дисперсионными силами Ван-дер-Ваальса. Дисперсионная энергия E^D определяется выражением (3) и отражает дальнедействующее межчастичное взаимодействие [8]

$$E^D = -C \cdot r^{-6}, \quad (3)$$

где E^D – дисперсионная энергия, эВ, C – коэффициент, зависящий от природы молекул (дисперсионная константа), эВ·м⁶.

Коэффициент C в формуле (3) может быть приблизительно оценен по формуле Лондона [8]

$$C = \frac{3}{2} \alpha_R \alpha_T \frac{\overline{E}_R \cdot \overline{E}_T}{\overline{E}_R + \overline{E}_T}, \quad (4)$$

где α_R, α_T – величины поляризуемости двух взаимодействующих подсистем (молекул), м³; $\overline{E}_R, \overline{E}_T$ – средние энергии возбуждения (обычно аппроксимируют энергиями (потенциалами) ионизации), эВ.

На основе изложенного предположим, что энергия активации вязкого течения зависит от энергии дисперсионного взаимодействия и энергии структурирования жидкости в условиях вязкого течения

$$E_a = E_a(IP) + E_a(TI), \quad (5)$$

где IP – потенциал ионизации, эВ; TI – топологический индекс (топологический параметр).

Так как величина энергии активации вязкого течения служит косвенной характеристикой энергии межмолекулярного взаимодействия частиц [4, 8], она будет определяться взаимным расположением атомов в молекуле, т.е. топологией [9].

Таким образом, энергия активации вязкого течения связана с энергией ионизации и структурными характеристиками молекул.

Следовательно, можем записать

$$E_a = E_a(IP, TI). \quad (6)$$

Целью работы является изучение связи динамической вязкости нафтеновых углеводородов ряда циклопентана с ПИ и топологическими параметрами.

МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

В работе рассмотрено 13 соединений пятичленных углеводородов нафтенового ряда. Из них базовый ряд составляют 8 соединений, приведенных в табл. 1 под номерами 6-13. Соединения из табл. 1 под номерами 1-5 используются для проверки адекватности построенной модели.

Рассмотрим структуру молекулы как физическую величину, которую охарактеризуем численно с помощью топологических индексов из теории графов. Известно [9-12], что на энергию межмолекулярных взаимодействий значительное влияние оказывают корректные оценки размеров молекулы и степени их разветвленности. Поэтому в качестве ТИ, учитывающих размеры и форму графа, были рассмотрены индекс Винера, центрический индекс Балабана, индексы Рандича (индекс молекулярной связности), Гутмана (Сцегеда), Платта и Харари.

Будем считать, что энергии молекул одного и того же вещества равны. Следовательно, равны и их энергии (потенциалы) ионизации, т.е. $I_R = I_T$.

При условии равенства энергий ионизации взаимодействующих частиц имеем, что энергия дисперсионного взаимодействия пропорциональна ПИ. Следовательно, (3) перепишем в виде

$$E^D = -\frac{3}{4} \cdot \frac{1}{r^6} \cdot \alpha_R \alpha_T \cdot IP. \quad (7)$$

Формула (7) показывает, что энергия активации межмолекулярного взаимодействия частиц связана с энергией ионизации.

Вышесказанное еще раз подтверждает, что в общем виде энергия активации записывается формулой (6).

Разложим E_a в ряд Тейлора по степеням $(IP - IP_0)$, $(TI - TI_0)$ в окрестностях точки $(0, 0)$ и запишем линейный вид формулы (6)

$$E_a(IP, TI) = E_{a0} + IP \frac{\partial E_{a0}}{\partial TI} + TI \frac{\partial E_{a0}}{\partial IP} = \gamma + \alpha \cdot IP + \beta \cdot TI \quad (8)$$

где α , β , γ – константы в уравнениях: γ – вклад в энергию активации, которая определяется недисперсионными силами и не зависит от структуры молекул, Дж/моль; α – коэффициент, характеризующий вклад дисперсионных сил, (1 эВ = 96500 Дж/моль); β – коэффициент, характеризующий энергию изменения структуры молекулы в процессе вязкого течения, Дж/моль.

Изучены углеводородные жидкости ряда циклопентана. Вязкости углеводородов были выбраны из справочных данных [13-15].

Для определения энергии активации вязкого течения методом наименьших квадратов была

построена по экспериментальным данным линейная зависимость десятичного логарифма коэффициента вязкости от обратной температуры. При расчете $\ln(\eta_0)$ использовали значение вязкости (Па·с) умноженное на 10^6 . Данные расчетов приведены в табл. 1.

В данной работе для ряда циклопентана с достоверностью $R^2 = 0,94$ был установлен кинетический компенсационный эффект [16, 17], который описывается уравнением

$$\ln(\eta_0) = k \cdot E_a + m \quad (9)$$

где k , m – константы в уравнениях, $k = -0,0002$ моль/кДж, $m = -9,567$.

Таблица 1

Экспериментальные и расчетные данные
Table 1. Experimental and calculated data

№	Название	Количественные характеристики реакционной способности		Топологические индексы							Потенциал ионизации		Вязкость $\eta \cdot 10^3$, Па·с при температуре 293К
		$\ln(\eta_0)$	Еа, Дж/моль	Платт	Рандич	Балабан	Харари	Гипер-Винер	Сце-гед	Винер	Эксперим.	Расчет	
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14
Соединения для проверки													
1	циклопентан	-11,004	7961,40	10	1,5	2,08	7,5	20	20	15	10,9	10,283	0,438
2	метилциклопентан	-11,123	8590,88	14	2,89	2,18	10,17	39	33	26	10,4	10,276	0,503
3	этилциклопентан	-10,89	8300,44	16	3,43	1,83	12,83	75	52	43	10,12	10,271	0,564
4	пропилциклопентан	-10,782	8504,45	18	3,93	2,06	15,57	135	78	67	10	10,268	0,683
5	бутилциклопентан	-11,045	9790,01	20	4,43	1,76	18,38	227	112	99	9,95	10,267	0,890
Базовый ряд													
6	пентилциклопентан	-11,194	10788,04	22	4,93	1,91	21,29	360	155	140		10,265	1,155
7	гексилциклопентан	-11,408	11955,60	24	5,43	1,69	24,27	544	208	191		10,239	1,507
8	гептилциклопентан	-11,435	12564,72	26	5,93	1,81	27,34	790	272	253		10,137	1,884
9	октилциклопентан	-11,615	13613,44	28	6,43	1,64	30,48	1110	348	327		10,096	2,420
10	нонилциклопентан	-11,679	14205,95	30	6,93	1,75	33,69	1517	437	414		10,076	2,896
11	децилциклопентан	-11,851	14972,96	32	7,43	1,61	36,96	2025	540	515		10,038	3,341
12	изопропилциклопентан	-10,891	8842,67	20	3,8	2,24	16	114	73	62		10,272	0,704
13	1,3-диметилциклопентан	-11,13	8647,39	18	3,29	1,93	13,08	68	51	41		10,285	0,511

Для характеристики структурной составляющей энергии активации вязкого течения использовали топологические индексы [9-12].

Простой индекс Винера (без учета кратных и ароматических связей)

$$W = \frac{1}{2} \cdot \sum_{u,v \in V(G)} d_G(u,v),$$

где V – множество вершин ненаправленного графа G , $d_G(u,v)$ – расстояние между вершинами молекулярного графа (МГ).

Индекс Харари

$$H(G) = \sum_{u,v \in V(G)} \frac{1}{d_G(u,v)}.$$

Гипериндекс Винера

$$W = \frac{1}{2} \cdot \sum_{u,v \in V(G)} d_G(u,v) + \frac{1}{2} \cdot \sum_{u,v \in V(G)} (d_G(u,v))^2.$$

Индекс Платта

$$F = \sum_{f=1}^n \deg e_f,$$

где $\deg e_f$ – число ребер, смежных с ребром f_i , n – общее число ребер в МГ.

Индекс Балабана

$$J = \frac{N}{\mu + 1} \cdot \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^n \frac{1}{\sqrt{D_i D_j}}$$

где N – число ребер, μ – количество колец в графе, i и j – соседние вершины, $D_i(D_j)$ – сумма расстояний (по строке) для i-ой (j-ой) вершины в матрице расстояний.

Индекс Рандича

$$^1\chi = \sum_{k=1}^n \frac{1}{\sqrt{v_i \cdot v_j}}$$

где v_i, v_j – степени соседних вершин i и j в МГ, n – количество ребер графа.

Индекс Сцегида

$$Sz_e = \sum_{e=uv} n_u(e) \cdot n_v(e),$$

где $e = uv$ – ребро МГ между вершинами u и v, $n_u(e)$ – число ребер в кратчайшем пути, соединяющим вершину ребра u и вершину МГ i. Аналогично определяется $n_v(e)$. Суммирование ведется по всем ребрам. Случай $n_u(e) = n_v(e)$ не учитывается при расчете индекса.

Таблица 2

Сравнение рассчитанных значений с экспериментальными данными
Table 2. Comparison between theoretical calculation and experimental data

№	Углеводородные жидкости	По формуле (8) Ea, Дж/моль	По уравнению (9) ln(η0)	относительные ошибки, % Ea ln(η0)		Динамическая вязкость η · 10 ³ , Па·с			
						Расчет при температуре 293 К		Относительные ошибки (сравнение с экспериментом), %	
						По (2)	По (10)	По (2)	По (10)
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Базовый ряд									
6	пентилциклопентан	10508,94	-11,67	2,59	4,24	0,641	1,166	44,53	0,88
7	гексилциклопентан	11204,67	-11,81	6,28	3,51	0,742	1,473	50,75	2,21
8	гептилциклопентан	12125,55	-11,99	3,50	4,87	0,901	1,881	52,17	0,14
9	октилциклопентан	13138,53	-12,19	3,49	4,99	1,115	2,329	53,92	3,76
10	нонилциклопентан	14299,39	-12,43	0,66	6,40	1,424	2,843	50,81	1,83
11	децилциклопентан	15662,83	-12,70	4,61	7,16	1,898	3,446	43,18	3,15
12	изопропилциклопентан	9479,83	-11,46	7,21	5,25	0,516	0,710	26,68	0,94
13	1,3-диметилциклопентан	9190,90	-11,41	6,29	2,47	0,485	0,582	5,06	13,90
	Средние значения			4,33	4,86			40,89	3,35
Соединения для проверки									
1	циклопентан	8852,49	-11,34	11,19	3,03	0,452	0,433	3,30	1,13
2	метилциклопентан	9004,03	-11,37	4,81	2,20	0,467	0,500	7,24	0,68
3	этилциклопентан	9232,03	-11,41	11,22	4,81	0,490	0,601	13,13	6,54
4	пропилциклопентан	9549,59	-11,48	12,29	6,45	0,524	0,741	23,33	8,53
5	бутилциклопентан	9969,79	-11,56	1,84	4,67	0,572	0,927	35,73	4,15
	Средние значения			8,27	4,23			16,55	4,21

Если цикл имеет n ребер, которые все симметрично эквивалентны, т.е. в МГ нет боковых ответвлений, то для n четного имеем $n_u(e) = n_v(e) = n/2$, для n нечетного – $n_u(e) = n_v(e) = (n-1)/2$. Соответственно формула для расчета индекса Сцегида (Гутмана) примет вид

$$Sz = n \cdot \left[\frac{n}{2} \cdot \frac{n}{2} \right] = \frac{n^3}{4}, n - \text{четное и}$$

$$Sz = n \cdot \left[\frac{n-1}{2} \cdot \frac{n-1}{2} \right] = \frac{n \cdot (n-1)^2}{4}, n - \text{нечетное}$$

Значения ПИ рассчитывались методом ТФП (B3LYP/6-31G(d)) с использованием пакета прикладных программ Gaussian 98W [18] с полной оптимизацией геометрии молекул.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

По данным, входящим в базовый ряд и приведенным в табл. 1, была построена зависимость энергии активации от потенциалов ионизации и топологических индексов Винера, описываемая уравнением (8), где $\gamma = 19624,69$ Дж/моль, $\alpha = -1066,68$ Дж/(моль·эВ), $\beta = 13,09$ Дж/моль с коэффициентом $R^2 = 0,94$. Вычисленные по формуле (8) значения E_a приведены в табл. 2 (столбец 3).

В табл. 1 по данным [13-15] приведены экспериментальные значения коэффициента динамической вязкости $\eta_0 \cdot 10^3$ Па·с при атмосферном давлении.

лении 1 атм (столбец 6) в зависимости от температуры (столбец 5). Все соединения рассмотрены в жидкой фазе.

Подставляя в уравнение (9) вычисленные по формуле (8) значения E_a , рассчитали предэкспоненты Аррениуса (табл. 2, столбец 4).

В столбце 7 (табл.2) приведены значения коэффициентов динамической вязкости, полученные по формуле (2), используя данные столбцов 3 и 4 при указанной в столбце 5 температуре.

Из табл.1 видно, что наличие боковых разветвлений в молекулах нафтенов повышают вязкость.

Для проверки адекватности квантовых расчетов была построена линейная зависимость между теоретическими (рассчитанными) значениями ПИ и экспериментальными значениями ПИ (рис. 1), полученными другими авторами методами фотоэлектронной спектроскопии и фотоионизации [19, 20].

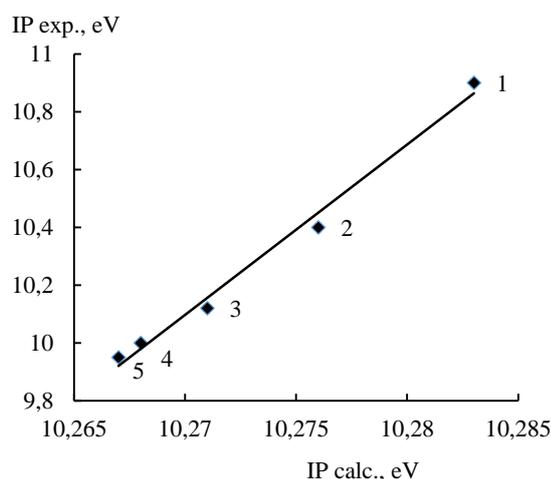


Рис. 1. Зависимость между теоретическими и экспериментальными значениями ПИ в рядах пятичленных (соединения 1,2,3,4,5) нафтенов

Fig. 1. Dependence between theoretical and experimental values of ionization potentials for five-membered naphthenes (compounds 1,2,3,4,5)

Коэффициент детерминации $R^2 = 0,99$ свидетельствует о хорошей корреляции между значениями ПИ, полученными экспериментальным путем и квантовыми расчетами.

Сравнивая вычисленные и экспериментальные данные по энергии активации для базового ряда, получили, что средняя абсолютная ошибка составляет 448,51 Дж/моль, относительная ошибка – 4,3%.

Для базового ряда среднее отклонение рассчитанных значений $\ln(\eta_0)$ от значений, полученных из экспериментальных данных, составляет 0,56. Относительная ошибка не превышает 4,9%.

Из табл. 2 были замечены большие расхождения между экспериментальными и вычисленными по формуле (2) значениями вязкости. Однако, эти значения хорошо коррелируют между собой (рис. 2) и связаны уравнением (10).

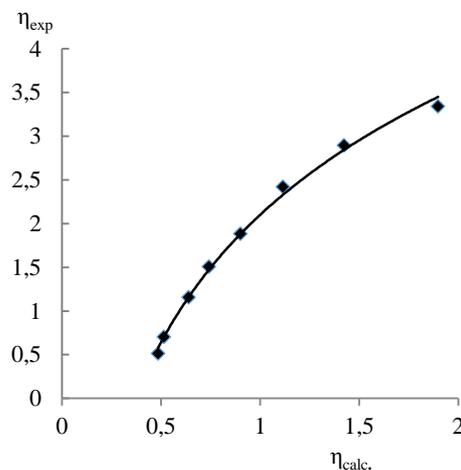


Рис. 2. Взаимосвязь экспериментальных (η_{exp}) и рассчитанных по формуле (2) (η_{calc}) значений вязкости
Fig. 2. Relationship between experimental data (η_{exp}) and calculated values (η_{calc}) of viscosity using the formula (2)

Из рис. 2 видно, что экспериментальные и рассчитанные по формуле (2) значения вязкости для базового ряда связаны логарифмической зависимостью с коэффициентом детерминации $R^2 = 0,996$ уравнением

$$\eta_{\text{эксп}} = 2,1 \cdot \ln(\eta_{\text{расч}}) + 2,1 \quad (10)$$

Для проверки прогностических возможностей уравнения (9) и адекватности прогноза была рассчитана динамическая вязкость пяти нафтеновых углеводородов, не входящих в базовый ряд. Полученные результаты приведены в табл. 2. Так для соединений с номерами 1-5 абсолютные ошибки для E_a и $\ln(\eta_0)$ составляют 692,15 Дж/моль и 0,46, относительные – 8,27% и 4,23% соответственно. Для динамической вязкости при температуре 293 К, вычисленной по уравнению (10), абсолютная ошибка составляет $16,55 \cdot 10^3$ Па·с, относительная ошибка равна 4,21%.

Из вышесказанного следует, что, окончательный вид формулы для нахождения вязкости можем записать в виде (10).

Обнаруженные взаимосвязи требуют теоретического объяснения с учетом дальнейшей возможной унификации применения электронной спектроскопии в реологии смежных прикладных направлениях исследований. Установленные закономерности могут быть использованы для прогно-

зирования вязкостных характеристик синтезированных и природных пятичленных нафтеносов.

ВЫВОДЫ

Из проведенных исследований установлено, что для соединений рядов пятичленных нафтеносов кажущаяся энергия активации вязкого течения и связанная с ней предэкспонента Аррениуса зависят от квантовых параметров (ПИ) и топологии молекул.

С применением полученной регрессионной модели типа «структура-свойства» при условии компенсационного эффекта динамической вязко-

сти рассчитаны динамические вязкости нафтеносовых углеводородов.

Предложен подход, позволяющий рассчитать динамические вязкости нафтеносовых углеводородов, используя квантовые (потенциалы ионизации) и молекулярные (топологические индексы Винера) параметры. Это дает возможность рассматривать ПИ и ТИ как дескрипторы, необходимые для количественной оценки энергии активации вязкого течения и динамической вязкости при условии использования компенсационного эффекта. Валидность установленных закономерностей подтверждает высокий коэффициент корреляции.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Kovaleva E., Dolomatov M., Latypov K., Koledin O., Paymurzina N.** Possibility of predicting activation energy for viscous flow in five-membered naphthenes by means of structural descriptors. *Am. J. Phys. Chem.* 2019. V. 8. N 1. P. 26-31. DOI: 10.11648/j.ajpc.20190801.14.
2. **Dezortsev S.V., Dolomatov M.Yu.** The connection of macroscopic and quantum properties of substances by example of n-alkanes. *J. Mater. Sci. Eng. A.* 2012. V. 2. N 11. P. 753-760.
3. **Доломатов М.Ю., Ковалева Э.А., Хамидулина Д.А.** Взаимосвязь макроскопических и квантовых характеристик динамической вязкости углеводородов при наличии компенсационного эффекта. *Журн. физ. химии.* 2018. Т. 92. № 5. С. 770-774. DOI: 10.7868/S0044453718050163.
4. **Мартынов Г.А.** Классическая статистическая механика. Теория жидкостей. Долгопрудный: Изд. Дом «Интеллект». 2011. 328 с.
5. **Poling B.E., Prausnitz J.M., O'Connell J.P.** The Properties of Gases and Liquids. New York: McGraw-Hill. 2001. 768 p. DOI: 10.1134/S0036024406110239.
6. **Штиллер В.** Уравнение Аррениуса и неравновесная кинетика. М.: Мир. 2000. 179 с.
7. **White F.M.** Viscous Fluid Flow. New York: McGraw-Hill Higher Education. 2006. 629 p.
8. **Каплан И.Г.** Межмолекулярные взаимодействия. Физическая интерпретация, компьютерные расчеты и модельные потенциалы. М.: БИНОМ. Лаборатория знаний. 2017. 394 с.
9. **Diudea M.V., Gutman I., Jäntschi L.** Molecular Topology. New York: NOVA. 2002. 335 p.
10. **Balaban A.T., Devillers J.** Topological indices and related descriptors in QSAR and QSPAR. Boca Raton: CRC Press. 2000. 811 p.
11. **Харари Ф.** Теория графов. М.: Едиториал УРС. 2003. 296 с.
12. Химические приложения топологии и теории графов. Под ред. Р. Кинга. М.: Мир. 1987. 560 с.
13. **Доломатов М.Ю., Павлов Т.И., Аубекеров Т.М.** База данных физико-химических свойств органических соединений: 201862459 // 2017.
14. **Viswanath D.S., Ghosh T.K., Prasad D.H.L., Dutt N.V.K., Rani K.Y.** Viscosity of liquids: theory, estimation, experiment and data. Dordrecht, The Netherlands: Springer Science & Business Media. 2007. 662 p.
15. NIST Chemistry WebBook. <http://webbook.nist.gov/chemistry/> DOI: 10.18434/T4D303.

REFERENCES

1. **Kovaleva E., Dolomatov M., Latypov K., Koledin O., Paymurzina N.** Possibility of predicting activation energy for viscous flow in five-membered naphthenes by means of structural descriptors. *Am. J. Phys. Chem.* 2019. V. 8. N 1. P. 26-31. DOI: 10.11648/j.ajpc.20190801.14.
2. **Dezortsev S.V., Dolomatov M.Yu.** The connection of macroscopic and quantum properties of substances by example of n-alkanes. *J. Mater. Sci. Eng. A.* 2012. V. 2. N 11. P. 753-760.
3. **Dolomatov M.Yu., Kovaleva E.A., Khamidullina D.A.** Relationship between the macroscopic and quantum characteristics of dynamic viscosity for hydrocarbons upon the compensation effect. *Russ. J. Phys. Chem. A.* 2018. V. 92. N 5. P. 943-947. DOI: 10.1134/S0036024418050084.
4. **Martynov G.A.** Classical statistical mechanics. The theory of liquids. Dolgoprudnyi: Intellekt. 2011. 328 p. (in Russian).
5. **Poling B.E., Prausnitz J.M., O'Connell J.P.** The Properties of Gases and Liquids. New York: McGraw-Hill. 2001. 768 p. DOI: 10.1134/S0036024406110239.
6. **Stiller W.** Arrhenius Equation and Non-Equilibrium Kinetics. M.: Mir. 2000. 179 p. (in Russian).
7. **White F.M.** Viscous Fluid Flow. New York: McGraw-Hill Higher Education. 2006. 629 p.
8. **Kaplan I.G.** Intermolecular Interactions. Physical Interpretation, Computer Calculations, and Model Potentials. M.: Binom. Laboratoriya znaniy. 2017. 394 p. (in Russian).
9. **Diudea M.V., Gutman I., Jäntschi L.** Molecular Topology. New York: NOVA. 2002. 335 p.
10. **Balaban A.T., Devillers J.** Topological indices and related descriptors in QSAR and QSPAR. Boca Raton: CRC Press. 2000. 811 p.
11. **Harari F.** Graph theory. M.: Editorial URSS. 2003. 296 p. (in Russian).
12. Chemical Applications of Topology and Graph Theory. Ed. by R. King. M.: Mir. 1987. 560 p. (in Russian).
13. **Dolomatov M.Yu., Pavlov T.I., Aubekero T.M.** Database for physic-chemical properties of organic compounds: 201862459 // 2017. (in Russian).
14. **Viswanath D.S., Ghosh T.K., Prasad D.H.L., Dutt N.V.K., Rani K.Y.** Viscosity of liquids: theory, estimation, experiment and data. Dordrecht, The Netherlands: Springer Science & Business Media. 2007. 662 p.
15. NIST Chemistry WebBook. <http://webbook.nist.gov/chemistry/> DOI: 10.18434/T4D303.
16. **Shakhparonov M.I., Sporkach V.S.** Theory of viscosity of liquids. II. Kinetic compensation effect in n-alkanes. *Zhurn. Fiz. Khim.* 1980. V. 54. N 2. P. 312-315 (in Russian).

16. **Шапаронов М.И., Сперкач В.С.** Теория вязкости жидкостей. II. Кинетический компенсационный эффект в п-алканах. *Журн. физ. химии*. 1980. Т. 54. № 2. С. 312-315.
17. **Буданов В.В.** Компенсационный эффект в кинетике химических реакций и определение возможности его существования. *Изв. вузов. Химия и хим. технология*. 2009. Т. 52. Вып. 8. С. 23-27.
18. **Бутырская Е.В.** Компьютерная химия: основы теории и работа с программами Gaussian и Gauss View. М.: СОЛОН-ПРЕСС. 2011. 224 с.
19. **Гурвич Л.В., Карачевцев Г.В., Кондратьев В.Н., Лебедев Ю.А., Медведев В.А., Потапов В.К., Ходеев Ю.С.** Энергия разрыва химических связей. Потенциалы ионизации и сродство к электрону. М.: Наука. 1974. 351 с.
20. **Степанов Н.Ф.** Квантовая механика и квантовая химия. М.: Мир. 2019. 519 с.
17. **Budanov V.V.** Compensatory effect in the kinetics of chemical reactions and determination of the possibility of its existence. *Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved. Khim. Khim. Tekhnol.* 2009. V. 52. N 8. P. 23-27 (in Russian).
18. **Butyrskaya E.V.** Computer chemistry: theory basis and work with Gaussian and Gauss View programmes. M.: SOLON-PRESS. 2011. 224 p. (in Russian).
19. **Gurvich L.V., Karachevtsev G.V., Kondrat'ev V.N., Lebedev Yu.A., Medvedev V.A., Potapov V.K., Khodeev Yu.S.** Energies of Chemical Bonds. Ionization Potentials and Electron Affinity. M.: Nauka. 1974. 351 p. (in Russian).
20. **Stepanov N.F.** Quantum mechanics and quantum chemistry. M.: Mir. 2001. 519 p. (in Russian).

Поступила в редакцию 03.07.2019

Принята к опубликованию 13.01.2020

Received 03.07.2019

Accepted 13.01.2020