

## ОЦЕНКА КРИТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ И СТАНДАРТНЫХ ТЕМПЕРАТУР КИПЕНИЯ УГЛЕВОДОРОДОВ АЛКИЛАРОМАТИЧЕСКОГО РЯДА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПРИНЦИПА «СТРУКТУРА-СВОЙСТВО»

М.Ю. Долوماتов, Э.А. Ковалева, Р.В. Гарипов

Михаил Юрьевич Долوماتов (0000-0003-2677-6993), Роберт Венерович Гарипов (ORCID 0000-0002-7654-1781)\*

Центр водородно-углеродных технологий, Уфимский государственный нефтяной технический университет, ул. Заки Валиди, 32/2, Уфа, Республика Башкортостан, Российская Федерация, 450076  
E-mail: mdolomatov@bk.ru, g4ripov.robert@yandex.ru\*

Элла Александровна Ковалева (ORCID 0000-0001-6539-4889)

Центр водородно-углеродных технологий, Уфимский государственный нефтяной технический университет, ул. Заки Валиди, 32/2, Уфа, Республика Башкортостан, Российская Федерация, 450076  
Кафедра автоматизации, телекоммуникации и метрологии, Уфимский государственный нефтяной технический университет, ул. Космонавтов, 1, Уфа, Республика Башкортостан, Российская Федерация, 450064  
E-mail: kovaleva-ugntu@yandex.ru

*На основе скейлингового подхода предложены эмпирические QSPR-модели для прогнозов критической температуры, критического давления и критического объема углеводородов алкилароматического ряда через известные стандартные температуры кипения. Необходимость в разработке моделей связана с оптимизацией технологических процессов получения алкилбензолов. Скейлинговый закон всегда определяет только некоторую асимптотику, применимость которой, учитывая специфику системы, необходимо анализировать конкретно для каждого случая. Полученные в работе модели адекватно описывают критические параметры фазового перехода жидкость-пар. Кроме того, рассмотрен вариант, когда стандартная температура кипения соединения неизвестна или не может быть определена, т.к. температура деструкции вещества лежит ниже температуры кипения. В этом случае на основе метода «структура-свойство», произведена оценка стандартных температур кипения углеводородов алкилароматического ряда через топологический индекс Цветковича, который косвенно отражает энергетический спектр. Адекватность моделей подтверждается статистическими оценками. Установлено, что критические свойства (температура, давление и объем) линейно и экспоненциально зависят от стандартной температуры кипения. Средняя ошибка аппроксимации (среднее относительное отклонение расчетных значений от фактических) для всех критических свойств рассматриваемых углеводородов не превышает 2%. Результаты основного показателя, отражающего меру качества модели, не ниже 97%. Для выбора оптимальной в смысле сложности модели из нескольких альтернатив использовался информационный критерий Акаике. Предлагаемые модели могут использоваться для прогноза свойств новых соединений в органической химии, а также для расчетов критических свойств в химической технологии и нефтехимии.*

**Ключевые слова:** углеводороды алкилароматического ряда, критическая температура, критическое давление, критический объем, стандартная температура кипения

### Для цитирования:

Долوماتов М.Ю., Ковалева Э.А., Гарипов Р.В. Оценка критических параметров и стандартных температур кипения углеводородов алкилароматического ряда с использованием принципа «структура-свойство». *Изв. вузов. Химия и хим. технология.* 2025. Т. 68. Вып. 6. С. 52–58. DOI: 10.6060/ivkkt.20256806.7175.

**For citation:**

Dolomatov M.Yu., Kovaleva E.A., Garipov R.V. Estimation of critical parameters and standard boiling points of alkylaromatic hydrocarbons using the quantitative structure-property relationships principle. *ChemChemTech [Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved. Khim. Khim. Tekhnol.]*. 2025. V. 68. N 6. P. 52–58. DOI: 10.6060/ivkkt.20256806.7175.

**ESTIMATION OF CRITICAL PARAMETERS AND STANDARD BOILING POINTS  
OF ALKYLAROMATIC HYDROCARBONS USING  
THE QUANTITATIVE STRUCTURE-PROPERTY RELATIONSHIPS PRINCIPLE**

**M.Yu. Dolomatov, E.A. Kovaleva, R.V. Garipov**

Mikhail Yu. Dolomatov (ORCID 0000-0003-2677-6993), Robert V. Garipov (ORCID 0000-0002-7654-1781)\*  
Hydrogen-Carbon Technologies Center, Ufa State Petroleum Technological University, Zaki Validi st., 32/2,  
Ufa, Republic of Bashkortostan, 450076, Russia  
E-mail: mdolomatov@bk.ru, g4ripov.robert@yandex.ru\*

Ella A. Kovaleva (ORCID 0000-0001-6539-4889)  
Hydrogen-Carbon Technologies Center, Ufa State Petroleum Technological University, Zaki Validi st., 32/2,  
Ufa, Republic of Bashkortostan, 450076, Russia  
Department of Automation, Telecommunications and Metrology, Ufa State Petroleum Technological University,  
Kosmonavtov st.,1, Ufa, Republic of Bashkortostan, 450064, Russia  
E-mail: kovaleva-ugntu@yandex.ru

*Based on the scaling approach, empirical QSRR models are proposed to predict the critical temperature, critical pressure, and critical volume of alkylaromatic hydrocarbons through the known standard boiling points. The need for the development of models is related to the optimization of technological processes for the production of alkylbenzenes. The scaling law always defines only some asymptotics, the applicability of which, taking into account the specificity of the system, should be analyzed specifically for each case. The models obtained in this work adequately describe the critical parameters of the liquid-vapor phase transition. In addition, we consider the case when the standard boiling point of a compound is unknown or cannot be determined because the substance is metastable and its degradation temperature is below the boiling point. In this case, based on the structure-property method, the standard boiling points of alkylaromatic hydrocarbons are estimated through the Cvetkovich topological index, which indirectly reflects the energy spectrum. The adequacy of the models is confirmed by statistical evaluations. It is found that the critical properties (temperature, pressure and volume) depend linearly and exponentially on the standard boiling point. The average approximation error (average relative deviation of calculated values from actual values) for all critical properties of the hydrocarbons under consideration does not exceed 2%. The results of the main indicator reflecting the measure of model quality are not lower than 97%. The Akaike information criterion was used to select the optimal model from several alternatives in terms of complexity. The proposed models can be used for prediction of properties of new compounds in organic chemistry, as well as for calculations of critical properties in chemical technology and petrochemistry.*

**Keywords:** alkylaromatic hydrocarbons, critical temperature, critical pressure, critical volume, standard boiling point

**ВВЕДЕНИЕ**

Алкилбензолы различного строения безопасны для окружающей среды и являются сырьем для производства мономеров, а также полупродуктами в производстве поверхностно-активных ве-

ществ, стабилизирующих присадок к маслам и топливам, в строительном производстве используются в качестве добавок в бетоны для придания им новых свойств [1]. Наиболее высокие темпы роста выпуска алкилбензолов ожидаются в развивающихся странах, так как там наблюдается активное

развитие промышленности в области выпуска синтетических моющих средств [2]. В России единственный производитель алкилбензолов – это ООО «Киришинефтеоргсинтез», выпускающий примерно 60 тыс. т алкилбензолов в год, из которых половина направляется на экспорт. Для оптимизации технологических процессов получения алкилбензолов необходимо знать термодинамические характеристики и критические параметры.

Критические температура, давление, объем представляют собой широко используемые константы, важные для технологии органического синтеза. Критический объем – удельный объем, занимаемый веществом при критической температуре и критическом давлении. Критический объем не поддается точному определению по той причине, что в критической точке малые изменения давления влекут за собой большие изменения объема. Критическая (жидкость-пар) температура ( $T_{кр}$ ) является одной из важнейших фундаментальных характеристик вещества. Ее значение необходимо знать при разработке материалов с заданными свойствами, оптимизации условий синтеза веществ в условиях высоких температур и давлений, и проведения процессов в сверхкритических условиях, при решении термодинамических задач, для проведения инженерных расчетов и понимания фундаментальных закономерностей химической технологии. Поскольку экспериментальное определение критических свойств вещества является трудоемким и сложным, предложены различные эмпирические прогностические модели для их оценки [3-9].

В основе современной теории критических явлений лежат критические показатели и гипотеза подобия (скейлинга) [10-12]. Суть данной теории заключается в изучении зависимости физико-химических свойств от пространственного масштаба, например, радиуса корреляции и параметра порядка, которые являются характеристиками фазового перехода [13]. Связь между критическими свойствами определяет скейлинговый закон. Скейлинговый закон всегда определяет только некоторую асимптотику, применимость которой, учитывая специфику системы, необходимо анализировать конкретно для каждого случая. Теоретический расчет критических параметров с использованием скейлинговых критериев Вильсона, Вегнера, а также методов теории ренорм группы применим только для самых простых веществ и не применим для расчетов сложных органических молекул. Для таких расчетов требуется информация о неэмпирических потенциалах взаимодействия ча-

стиц, что невозможно выполнить в рамках современной теории поля [14].

В ранее проведенных исследованиях было показано, что термодинамические, в том числе, критические свойства ряда углеводородов [15-18] адекватно описываются методами «структурасвойство» с применением топологических дескрипторов, в частности индексами Цветковича, которые связаны с собственными значениями спектров молекулярных графов. Характеристический полином матрицы смежности молекулярного графа (МГ) запишем в виде:

$$P(\lambda) = \lambda I - A, \quad (1)$$

где  $I$  – единичная матрица,  $A$  – матрица смежности МГ.

$$P(\lambda) = (-1)^n \det(A - \lambda E) = \lambda^n + a_1 \lambda^{n-1} + \dots + a_{n-1} \lambda + a_n, \quad (2)$$

где  $E$  – единичная матрица,  $\lambda_i, a_i, i = \overline{1, n}$  – корни, коэффициенты полинома соответственно.

Корни характеристического полинома являются собственными значениями матрицы смежности, которые для  $\pi$  электронных систем интерпретируются как хюккелевские энергетические уровни электрона в молекуле.

Собственные значения и собственные векторы графа описывают связи атомов в заданной системе [19]. Если граф  $G$  содержит  $n$  вершин и  $m$  ребер, то его спектр содержит  $n$  собственных значений  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$  для которых справедливы соотношения Саакса (3) и Цветковича (4)

$$\lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_n = 0 \quad (3)$$

$$\lambda_1^2 + \lambda_2^2 + \dots + \lambda_n^2 = 2m \quad (4)$$

Цель данной работы – разработка модели для адекватного прогнозирования критической температуры, критического давления и критического объема углеводородов алкилароматического ряда для фазовых переходов жидкость-пар.

#### МЕТОДИКА РАСЧЕТА

Рассмотрим возможные варианты для прогнозирования критических свойств углеводородов алкилароматического ряда в зависимости от стандартной (приведенной к нормальным условиям) температуры кипения. Первый вариант предполагает, что известна информация о стандартной температуре кипения соединений. Это позволяет непосредственно применить скейлинговый подход. Второй вариант допускает, что стандартная температура кипения соединения неизвестна или

не может быть определена, т.к. температура де-струкции вещества лежит ниже температуры кипения. В этом случае используется метод «структурасвойство», позволяющий оценить стандартную температуру кипения через топологический индекс

Цветковича, который косвенно отражает энергетический спектр.

В табл. 1 приведены расчетные данные критических свойств некоторых углеводородов алкилароматического ряда, которые согласуются с данными [20-22].

Таблица 1

Критические свойства некоторых углеводородов алкилароматического ряда  
Table 1. Critical properties of some hydrocarbons of the alkylaromatic series

Название вещества	Формула	$Z_{кр}$ , кг/м <sup>3</sup>	$T_{кип}$ , К	$T_{кр}$ , К	$P_{кр}$ , кПа	$V_{кр}$ , м <sup>3</sup> /кмоль	Индекс Цветковича
<b>Обучающая выборка</b>							
Бензол	C <sub>6</sub> H <sub>6</sub>	0,34	353,00	561,00	5080	0,256	12
Толуол	C <sub>7</sub> H <sub>8</sub>	0,27	384,00	593,95	4109	0,316	14
1,2-Диметилбензол	C <sub>8</sub> H <sub>10</sub>	0,26	417,50	631,45	3740	0,370	16
1,3-Диметилбензол	C <sub>8</sub> H <sub>10</sub>	0,24	413,00	622,00	3541	0,375	16
1,4-Диметилбензол	C <sub>8</sub> H <sub>10</sub>	0,27	411,40	617,55	3617	0,378	16
1,2-Диэтилбензол	C <sub>10</sub> H <sub>14</sub>	0,26	457,00	669,60	2990	0,487	20
1,3-Диэтилбензол	C <sub>10</sub> H <sub>14</sub>	0,26	454,30	663,60	2930	0,487	20
1,4-Диэтилбензол	C <sub>10</sub> H <sub>14</sub>	0,25	457,00	657,88	2803	0,480	20
Этилбензол	C <sub>8</sub> H <sub>10</sub>	0,26	409,30	619,55	3609	0,374	16
1-Пропилбензол	C <sub>9</sub> H <sub>12</sub>	0,27	432,40	638,75	3200	0,440	18
1,3-Дипропилбензол	C <sub>12</sub> H <sub>18</sub>	0,24	490,00	706,05	2370	0,600	24
Изопропилбензол	C <sub>9</sub> H <sub>12</sub>	0,26	425,60	635,85	3210	0,435	18
Бутилбензол	C <sub>10</sub> H <sub>14</sub>	0,26	456,00	660,50	2890	0,497	20
втор-Бутилбензол	C <sub>10</sub> H <sub>14</sub>	0,26	446,50	664,00	2940	0,481	20
Изобутилбензол	C <sub>10</sub> H <sub>14</sub>	0,27	445,94	655,00	3050	0,480	20
Пентилбензол	C <sub>11</sub> H <sub>16</sub>	0,25	470,00	679,90	2600	0,550	22
Изопентилбензол	C <sub>11</sub> H <sub>16</sub>	0,25	469,00	683,92	2671	0,537	22
Гексилбензол	C <sub>12</sub> H <sub>18</sub>	0,25	500,00	697,50	2380	0,620	24
Гептилбензол	C <sub>13</sub> H <sub>20</sub>	0,24	519,00	713,50	2200	0,660	26
Октилбензол	C <sub>14</sub> H <sub>22</sub>	0,24	538,00	728,00	2040	0,720	28
Нонилбензол	C <sub>15</sub> H <sub>24</sub>	0,24	555,20	741,00	1900	0,790	30
Децилбензол	C <sub>16</sub> H <sub>26</sub>	0,23	568,00	753,00	1780	0,824	32
1-Этил-2-пропилбензол	C <sub>11</sub> H <sub>16</sub>	0,25	474,10	685,93	2608	0,543	22
1-Метил-2-пропилбензол	C <sub>10</sub> H <sub>14</sub>	0,26	458,20	672,5	2964	0,490	20
1,4-Ди-н-бутилбензол	C <sub>14</sub> H <sub>22</sub>	0,23	536,65	746,43	1982	0,712	28
<b>Контрольная выборка</b>							
Пентаэтилбензол	C <sub>16</sub> H <sub>26</sub>	0,20	612,08	805,10	1622	0,824	32
Пентаметилбензол	C <sub>11</sub> H <sub>16</sub>	0,23	510,00	719,00	2490	0,543	22
1,2,3-Триметилбензол	C <sub>9</sub> H <sub>12</sub>	0,27	450,00	665,00	3443	0,431	18
1,2,3,5-Тетраметилбензол	C <sub>10</sub> H <sub>14</sub>	0,25	471,30	679,00	2870	0,487	20
1,2,3,5-Тетраэтилбензол	C <sub>14</sub> H <sub>22</sub>	0,22	561,34	758,43	1930,44	0,712	28
1,2,4-Триметилбензол	C <sub>9</sub> H <sub>12</sub>	0,27	443,00	649,10	3382	0,435	18
1,2,4,5-Тетраметилбензол	C <sub>10</sub> H <sub>14</sub>	0,25	470,00	675,80	2900	0,487	20
1,3,5-Триметилбензол	C <sub>9</sub> H <sub>12</sub>	0,27	437,85	637,30	3260	0,431	18
1,2,4-Триэтилбензол	C <sub>12</sub> H <sub>18</sub>	0,25	492,00	684,40	2340	0,600	24
1,3,5-Триэтилбензол	C <sub>12</sub> H <sub>18</sub>	0,26	489,00	681,00	2435	0,600	24
1,2,3-Триэтилбензол	C <sub>12</sub> H <sub>18</sub>	0,24	510,60	712,18	2336	0,600	24

## РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Проведем оценку значений стандартной температуры кипения, зная только индекс Цветковича:  $T_{кип} = f(\Pi)$ .

Для обучающей выборки (25 соединений) получена простая линейная зависимость вида:

$$T_{кип} = a_0 + a_1 \Pi \quad (5)$$

где  $a_0 = 240,619$ ,  $a_1 = 10,545$ .

Данная зависимость (5) позволяет оценить  $T_{кр}$  с достоверностью  $R^2 \approx 0,99$ . Для контрольной выборки (11 соединений)  $R^2 \approx 0,94$ .

Следовательно, можно предположить, что температуры кипения углеводородов алкилароматического ряда зависят от их строения, а именно от спектра графа молекулы.

Известно, что скейлинговая функция  $Q_A(x_L)$  в критической области должна удовлетворять асимптотическому условию:

$$\lim_{x \rightarrow 0} Q_A(x) \rightarrow 1.$$

Поэтому скейлинговые функции выбирались как в виде степенной зависимости от  $x$ :

$$Q_A(x) \approx 1 + c_n x^n,$$

так и экспоненциальной

$$Q_A(x) \approx 1 + c_n e^{n \cdot x},$$

с подбираемыми по методу наименьших квадратов коэффициентами  $c_n$ .

Рассмотрим однородную экспоненциальную функцию

$$T_{кр} = f(T_{кип})$$

Для выбора оптимальной в смысле сложности модели из нескольких альтернатив использовался информационный критерий Акаике [23]

$$AIC = \ln \frac{RSS}{n} + \frac{n+k}{n-k-2}, \quad (6)$$

где  $n$  – объем обучающей выборки,  $k$  – число параметров модели, включая свободный член,  $RSS$  – сумма квадратов отклонений от предсказываемых моделью значений.

Лучшие модели (с минимальным значением информационного критерия Акаике) представлены в табл. 2.

Проверка адекватности моделей проводилась на контрольной выборке. Результаты основного показателя  $R^2$ , отражающего меру качества модели, приведены в табл. 2.

Средняя ошибка аппроксимации (среднее относительное отклонение расчетных значений от фактических)

$$\bar{A} = \frac{1}{n} \sum \left| \frac{y - \hat{y}}{y} \right| \cdot 100\%$$

для всех критических свойств рассматриваемых углеводородов не превышает 2%.

Кроме того, критические параметры вещества связаны соотношением

$$Z_{кр} = \frac{P_{кр} \cdot V_{кр}}{R \cdot T_{кр}} \quad (7)$$

где  $Z_{кр}$  – критический коэффициент сжимаемости;  $R$  – универсальная газовая постоянная

Данные расчетов приведены в табл. 1.

Таблица 2

Некоторые модели для оценки критических свойств в ряду алкилбензолов  
Table 2. Some models for estimation of critical properties in the alkylbenzenes series

Модель	Значения коэффициента детерминации $R^2$	
	Для обучающей выборки	Для контрольной выборки
$T_{кр} = 0,89 \cdot T_{кип} + 256$	$R^2 \approx 0,98$	$R^2 \approx 0,98$
$T_{кр} = 1 + 363,5 \cdot e^{0,0013T_{кип}}$	$R^2 \approx 0,97$	$R^2 \approx 0,98$
$P_{кр} = 1 + 24961 \cdot e^{-0,005T_{кип}}$	$R^2 \approx 0,98$	$R^2 \approx 0,98$
$V_{кр} = -0,731 + 0,003 \cdot T_{кип}$	$R^2 \approx 0,99$	$R^2 \approx 0,99$

## ВЫВОДЫ

Построены модели «структура-свойство» для оценки термодинамических свойств на основе скейлинга и топологического подхода. Установлено, что критические свойства (температура, давление и объем) адекватно описываются линейными и экспоненциальными функциями и зависят от стандартной температуры кипения. В свою очередь, стандартная температура кипения достаточно точно описывается с помощью топологического индекса Цветковича. Адекватность моделей подтверждается статистическими оценками. Предлагаемые модели могут использоваться для прогноза свойств новых соединений в органической химии, а также для расчетов критических свойств в химической технологии и нефтехимии.

Результаты исследования могут быть применены для прогнозирования температур кипения и критических параметров новых продуктов синтеза. Технологическое приложения работы заключаются в возможном использовании в нефтехимии при расчете тарельчатых и насадочных ректификационных колонн для разделения смесей алкилароматических углеводородов. Кроме того, возможно прогнозирование температуры кипения и критических свойств многокомпонентных систем ароматических углеводородов при наличии данных о составе этих смесей на основании хроматографического анализа.

## КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов, требующего раскрытия в данной статье.

The authors declare the absence of a conflict of interest warranting disclosure in this article.

## ЛИТЕРАТУРА

1. **Воденкова Н.Н., Леолько А.С., Нестерова Т.Н., Леванова С.В.** Индексы Ковача и нормальные температуры кипения алкилбензолов. *Изв. вузов. Химия и хим. технология*. 2005. Т. 48. Вып. 10. С. 33-39.
2. Химия и нефтехимия [Электронный ресурс]. URL: <http://rccnews.ru/Rus/Tenders/?ID=44082>.
3. **Полихрониди Н.Г., Батырова Р.Г., Абдулагатов И.М.** Критические и сверхкритические явления в бензоле. *Сверхкрит. Флюиды: Теория и Практика*. 2019. Т. 14. Вып. 2. С. 73-104. DOI: 10.34984/SCFTP.2019.14.2.007.
4. **Рид Р., Праусниц Дж., Шервуд Т.** Свойства газов и жидкостей. Л.: Химия. 1982. 592 с.
5. **Базаев Э.А., Базаев А.Р.** Фазовые превращения и критические свойства системы  $C_3H_7OH-C_5H_{12}$ . *Теплофизика высоких температур*. 2022. Т. 60. Вып. 1. С. 38-45. DOI: 10.31857/S0040364422010136.
6. **Доломатов М.Ю., Ковалева Э.А., Валеева Н.С., Паймурзина Н.Х.** Оценочный прогноз критических объемов алкилзамещенных нафталинов в фазовых переходах жидкость-пар. *Изв. вузов. Химия и хим. технология*. 2021. Т. 64. Вып. 11. С. 57-64. DOI: 10.6060/ivkkt.20216411.6414.
7. **Naumkin P.V., Toikka A.M., Nesterova T.N., Nesterov I.A., Shakun V.A.** Theory and practice of alkyl aromatic hydrocarbon synthesis. 1. branched alkylbenzenes. *Ind. Eng. Chem. Res.* 2015. V. 54. N 35. P. 8629-8639. DOI: 10.1021/acs.iecr.5b02021.
8. **He M., Liu Y., Liu X.** Prediction of critical temperature and critical pressure of multi-component mixtures. *Fluid Phase Equilibria*. 2017. V. 441. P. 2-8. DOI: 10.1016/j.fluid.2016.11.017.
9. **Раевский О.А.** Моделирование соотношений «структура-свойство». М.: Добросвет: КДУ. 2015. 288 с.
10. **Потапов А.А.** Глобальный фрактально-скейлинговый метод и фрактальная парадигма в моделировании физико-технических процессов и сред. *Вестн. Тамбов. ун-та. Сер.: Естеств. и технич. науки*. 2013. Т. 18. № 5-2. С. 2645-2646.
11. **Скворцова М.И., Станкевич И.В., Палонин В.А., Зефирова Н.С.** Концепция молекулярного подобия и ее использование для прогнозирования свойств химических соединений. *Усп. химии*. 2006. Т. 75. № 11. С. 1074-1093. DOI: 10.1070/RC2006v075n11ABEH003616.
12. **Мюллер Х.** Скейлинг как фундаментальное свойство собственных колебаний вещества и фрактальная структура пространства-времени. *Основания физики и геометрии*. 2008. С. 189-209.
13. **Анисимов М.А., Городецкий Е.Е., Запрудский В.М.** Фазовые переходы с взаимодействующими параметрами порядка. *Усп. физ. наук*. 1981. Т. 133. С. 103-137. DOI: 10.3367/UFNr.0133.198101d.0103.
14. **Паташинский А.З., Покровский В.Л.** Метод ренорм-группы в теории фазовых переходов. *Усп. физ. наук*. 1977. Т. 121. Вып. 1. С. 55-96. DOI: 10.3367/UFNr.0121.197701b.0055.
15. **Yaws C.L.** Yaws' Handbook of Thermodynamic and Physical Properties of Chemical Compounds. New York: Norwich. 2003. 779 p.
16. **Никитин Е.Д., Павлов П.А., Попов А.П.** ГСССД 268-2012. Таблицы стандартных справочных данных. Критическая температура и критическое давление индивидуальных веществ. М.: Росс. науч.-техн. центр инф. по

## REFERENCES

1. **Vodenkova N.N., Leolko A.S., Nesterova T.N., Levanova S.V.** Indeksy Kovacs indices and normal boiling points of alkylbenzenes. *ChemChemTech [Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved. Khim. Khim. Tekhnol.]*. 2005. V. 48. N 10. P. 33-39 (in Russian).
2. Chemistry and petrochemistry [Electronic source]. URL: <http://rccnews.ru/Rus/Tenders/?ID=44082> (in Russian).
3. **Polikhronidi N.G., Batyrova R.G., Abdulagatov I.M.** Critical and Supercritical Phenomena in Benzene. *Sverhkrit. Fluidy: Teoriya Praktika*. 2019. V. 14. N 2. P. 73-104 (in Russian). DOI: 10.34984/SCFTP.2019.14.2.007.
4. **Reid R.C., Prausnitz J.M., Sherwood T.K.** The properties of gases and liquids. McGraw-Hill. 1977. 688 p.
5. **Bazaev E.A., Bazaev A.R.** Phase Transitions and Critical Properties of  $C_3H_7OH-C_5H_{12}$  System. *Tepmofizika Vysokikh Temperatur*. 2022. V. 60. N 1. P. 38-45 (in Russian). DOI: 10.31857/S0040364422010136.
6. **Dolomatov M.Yu., Kovaleva E.A., Valeeva N.S., Paymurzina N.Kh.** Estimated forecast of critical volumes of alkyl-substituted naphthalenes in liquid-vapor phase transitions. *ChemChemTech [Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved. Khim. Khim. Tekhnol.]*. 2021. V. 64. N 11. P. 57-64 (in Russian). DOI: 10.6060/ivkkt.20216411.6414.
7. **Naumkin P.V., Toikka A.M., Nesterova T.N., Nesterov I.A., Shakun V.A.** Theory and practice of alkyl aromatic hydrocarbon synthesis. 1. branched alkylbenzenes. *Ind. Eng. Chem. Res.* 2015. V. 54. N 35. P. 8629-8639. DOI: 10.1021/acs.iecr.5b02021.
8. **He M., Liu Y., Liu X.** Prediction of critical temperature and critical pressure of multi-component mixtures. *Fluid Phase Equilibria*. 2017. V. 441. P. 2-8. DOI: 10.1016/j.fluid.2016.11.017.
9. **Raevskij O.A.** Modeling of structure-property relationships. М.: Dobrosvet. 2015. 288 p. (in Russian).
10. **Potapov A.A.** Global fractal-scaling method and fractal paradigm in modeling of physical and technology processes and environments. *Vest. Tambov Univer. Ser. Esst. Tekhnich. Nauki*. 2013. V. 18. N. 5. P. 2645-2646 (in Russian).
11. **Skvortsova M.I., Stankevich I.V., Palyulin V.A., Zefirov N.S.** Molecular similarity concept and its use for predicting the properties of chemical compounds. *Russ. Chem. Rev.* 2006. V. 75. N 11. P. 961-979. DOI: 10.1070/RC2006v075n11ABEH003616.
12. **Muller H.** Scaling as Fundamental Property of Natural Oscillations the Fractal Structure of Space-Time. *Foundations of physics and geometry*. 2008. P. 189-209 (in Russian).
13. **Anisimov M.A., Gorodetskii E.E., Zaprudskii V.M.** Thermo-dynamics of the critical state of individual substances. *Sov. Phys. Usp.* 1981. V. 24. P. 57-75. DOI: 10.1070/PU1981v024n01ABEH004612.
14. **Patashinskii A.Z., Pokrovskii V.L.** The renormalization-group method in the theory of phase transitions. *Sov. Phys. Usp.* 1977. V. 20. P. 31-54. DOI: 10.1070/PU1977v020n01ABEH005315.
15. **Yaws C.L.** Yaws' Handbook of Thermodynamic and Physical Properties of Chemical Compounds. New York: Norwich. 2003. 779 p.
16. **Nikitin E.D., Pavlov P.A., Popov A.P.** GSSSD 268-2012. Tables of standard reference data. Critical temperatures and critical pressures of individual substances. М.: Russian Scientific and Technical Centre for Information on Standardization, Metrology and Conformity Assessment. 2012. 27 p. (in Russian).

- стандартизации, метрологии и оценке соответствия. 2012. 27 с.
17. **Долوماتов М.Ю., Коледин О.С., Ковалева Э.А., Аубекеров Т.М.** Прогнозирование физико-химических свойств компонентов углеводородных систем с применением топологических дескрипторов. Казань: Изд-во «Иннов.-изд. дом «Бутлеров. наследие». 2021. 164 с.
  18. **Долوماتов М.Ю., Коледин О.С., Ахтямова К.Р.** Модель QSPR для прогноза температур вспышки алканов по топологическим характеристикам молекул. *Изв. вузов. Химия и хим. технология*. 2021. Т. 64. Вып. 7. С. 96-103. DOI: 10.6060/ivkkt.20216407.6394.
  19. **Харари Ф.** Теория графов. М.: Ленанд. 2023. 304 с.
  20. Cheméo - High Quality Chemical Properties. [Электронный ресурс]. URL: <https://www.chemeo.com/>.
  21. NIST Chemistry WebBook: NIST standard Reference Database Number 69. U.S. Department of commerce. 2023. [Электронный ресурс]. URL: <https://webbook.nist.gov/chemistry/>.
  22. Ethermo Thermodynamic & Transport Properties Calculation Platform. [Электронный ресурс]. URL: <http://ethermo.us>.
  23. **Cavanaugh J.E.** Unifying the derivations for the Akaike and corrected Akaike information criteria. *Stat. Probabil. Lett.* 1997. V. 33. N 2. P. 201-208. DOI: 10.1016/S0167-7152(96)00128-9.
  17. **Dolomatov M.Yu., Koledin O.S., Kovaleva E.A., Aubekеров T.M.** Prediction the physicochemical properties of the components of hydrocarbon system using topological descriptors. Kazan: Izd. OOO "Innovats.o-izd. dom "Butlerov. Naslediye". 2021. 164 p.
  18. **Dolomatov M.Y., Koledin O.S., Akhtyamova K.R.** Модель QSPR для прогноза температур вспышки алканов по топологическим характеристикам молекул. *Chem-ChemTech [Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved. Khim. Khim. Tekhnol.]*. 2021. V. 64. N 7. P. 96-103 (in Russian). DOI: 10.6060/ivkkt.20216407.6394.
  19. **Harary F.** Graph Theory. M.: Lenand. 2023. 304 p.
  20. Cheméo - High Quality Chemical Properties. [Электронный ресурс]. URL: <https://www.chemeo.com/>.
  21. NIST Chemistry WebBook: NIST standard Reference Database Number 69. U.S. Department of commerce. 2023. [Electronic resource]. URL: <https://webbook.nist.gov/chemistry/>.
  22. Ethermo Thermodynamic & Transport Properties Calculation Platform. [Электронный ресурс]. URL: <http://ethermo.us>.
  23. **Cavanaugh J.E.** Unifying the derivations for the Akaike and corrected Akaike information criteria. *Stat. Probabil. Lett.* 1997. V. 33. N 2. P. 201-208. DOI: 10.1016/S0167-7152(96)00128-9.

Поступила в редакцию 21.11.2024

Принята к опубликованию 04.02.2025

Received 21.11.2024

Accepted 04.02.2025