

ЕДИНЫЙ ЗАКОН ВАРИАЦИЙ РАЗЛИЧНЫХ СВОЙСТВ ОРГАНИЧЕСКИХ  
СОЕДИНЕНИЙ В ГОМОЛОГИЧЕСКИХ РЯДАХ

Зенкевич И.Г.

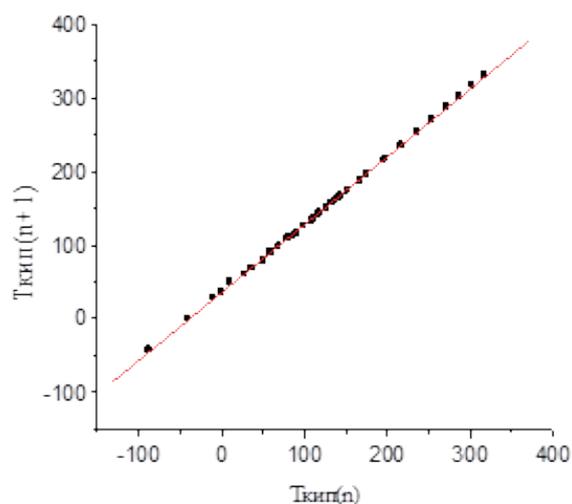
Санкт-Петербургский государственный университет, Институт химии,  
198504 Санкт-Петербург, Университетский проспект 26  
e-mail: izenkevich@yandex.ru

Аппроксимация различных свойств ( $A$ ) гомологов органических соединений всегда относилась к важнейшим задачам химии. Необычное уни-версальное решение этой задачи возможно с использованием линейных рекуррентных соотношений первого порядка:

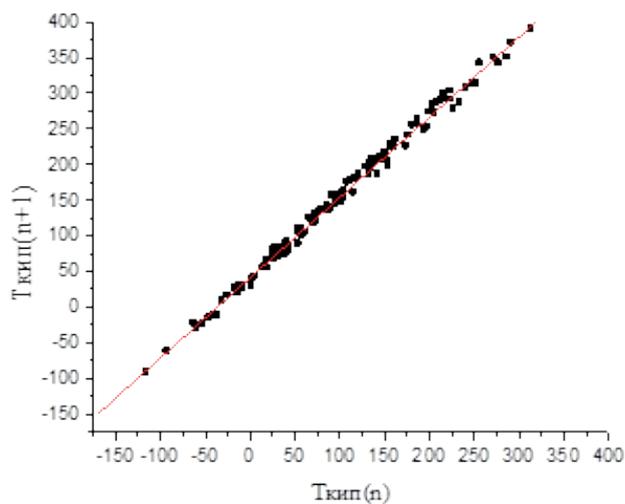
$$A(n+1) = aA(n) + b \quad (1)$$

где  $A(n)$  – значение свойства  $A$  для гомолога, содержащего  $n$  атомов углерода в молекуле,  $A(n+1)$  – то же для гомолога, содержащего  $(n+1)$  атомов углерода, коэффициенты  $a$  и  $b$  вычисляются методом наименьших квадратов. Коэффициенты корреляции ( $R$ ) для различных свойств гомологов разных рядов чаще всего превышают 0.999.

Зависимость (1) позволяет оценивать свойства следующих гомологов на основании данных для предыдущих членов рядов и применима к нормальным температурам кипения ( $T_{\text{кип}}$ ) (Рис. 1а), показателям преломления ( $n_D^{20}$ ), относительным плотностям ( $d_4^{20}$ ), диэлектрическим проницаемостям ( $\epsilon$ ), константам кислотности ( $pK_a$ ) и другим. Более того, показано, что единые зависимости вида (1) характеризуют разные гомологические ряды с одинаковыми гомологическими разностями, прежде всего  $\text{CH}_2$  (Рис. 1б).



(а)



(б)

Рисунок 1. Графики рекуррентной зависимости нормальных температур кипения ( $T_{\text{кип}}$ , °C) алканов  $\text{C}_n \text{H}_{2n+2}$  ( $N = 39$ ,  $R = 0.9997$ ) и единой зависимости для соединений разных классов ( $N = 131$ ,  $R = 0.9988$ ).