

По теории Усановича, ион Na^+ является слабой кислотой, а Cl^- – слабым основанием. В связи с этим соль хлорида натрия не подвергается гидролизу.

Таким образом, теории кислот и оснований объясняют многие химические процессы с новой позиции, учитывая кислотно–основные свойства участвующих в них соединений.

Список использованной литературы

1. Крешков А.П. Основы аналитической химии – М: Химия, 1976–480с
2. Хьюи Дж. Неорганическая химия. Строения вещества и реакционная способность перевод с английского – М: Химия, 1987–696с
3. Нурахметов Н.Н., Бекишев К.Б., Заграничная Н.А. Химия – Алматы: Мектеп, 2006–336с

Прогнозирование теплоты образования химических соединений методами QSPR

Авторы: Кожукова М.Н., Самолук Е.А.

Научные руководители: Важев В.В., Губенко М.А.

Костанайский государственный педагогический институт

Теплота (или энтальпия) образования (ΔH_f°) является фундаментальным термодинамическим свойством. Она используется для предсказания физико–химических особенностей составов. Таким образом, теплота образования важна в исследовании энергий связи, энергий резонанса, природы химических связей, вычисления констант равновесия реакций и т.д. [1, 5, 6].

В работе Wang Y.N, Chen J. W, Li X. H, Wang B, Cai X. Y, Huang L. P. теплота образования ряда алкилбензолов была соотнесена с физико–химическими и топологическими дескрипторами, рассчитанными с помощью методов QSPR [2].

В нашей работе выполнено моделирование теплоты образования алкилбензолов для 26 соединений с использованием дескрипторов, генерируемых программой Dragon. Качество прогнозирования для 7 веществ тренировочной выборки характеризуется коэффициентом корреляции $R = 0,9952$ и стандартной ошибкой $s = 1,876$, а для 19 веществ контрольной выборки $R = 0,9403$, $s = 5,911$.

Результаты моделирования представлены в таблице 1. Первые 7 веществ – тренировочная выборка (рис. 1), следующие 19 веществ – контрольная выборка (рис. 2).

Таблица 1 – Экспериментальные и рассчитанные значения теплот образования алкилбензолов по молекулярным дескрипторам

№	Соединение	CAS	MW	Эксп.	Рассч.	Разн.
1	2	3	4	5	6	7
1.	m-xylene	108-38-3	106.18	17.30	18.85	-1.55
2.	o-xylene	95-47-6	106.18	19.10	16.06	3.04
3.	1,2,3-trimethylbenzene	526-73-8	120.21	-9.6	-7.93	-1.67
4.	propylbenzene	103-65-1	120.21	7.91	7.22	0.69
5.	isobutylbenzene	538-93-2	134.24	-21.9	-	23.00
6.	butylbenzene	104-51-8	134.24	-	-	13.14
7.	benzene	71-43-2	78.12	50.5	51.00	-0.50
8.	o-ethyltoluene	611-14-3	120.21	1.30	-4.50	5.80
9.	1-methyl-2-tert-butylbenzene	1074-92-6	148.27	-	-	48.70
10.	m-ethyltoluene	620-14-4	120.21	-1.9	-5.72	49.94
11.	cumene	98-82-8	120.21	4.00	-3.20	3.82
12.	p-ethyltoluene	622-96-8	120.21	-3.3	-8.40	7.20
13.	2-phenylpentane	2719-52-0	148.27	-	-	37.60
14.	1-methyl-4-butylbenzene	1595-05-7	148.27	-	-	45.90
15.	1-methyl-4-sec-butylbenzene	1595-16-0	148.27	-	-	49.60
16.	1,2,4-triethylbenzene	877-44-1	162.3	-	-	71.09
17.	1-phenyl-2-methylbutane	3968-85-2	148.27	-	-	41.00
18.	1-ethyl-3-isopropylbenzene	4920-99-4	148.27	-	-	47.70
19.	1,2,4-trimethylbenzene	95-63-6	120.21	-13.9	-	17.54
20.	1-methyl-4-tert-butylbenzene	98-51-1	148.27	-57	-	55.28
21.	sec-butylbenzene	135-98-8	134.24	-17.4	-	23.86
22.	1-phenyl-2,2-dimethylpropane	1007-26-7	148.27	-	-	46.40
23.	1,2,4,5-tetramethylbenzene	95-93-2	134.24	-47.1	-	41.95
24.	1,2,3,5-tetramethylbenzene	527-53-7	134.24	-	-	44.70
25.	1,2,3,4-tetramethylbenzene	488-23-3	134.24	-	-	40.00

				41.80	43.19	
26.	ethylbenzene	100-41-4	106.18	4.00	21.74	-17.74

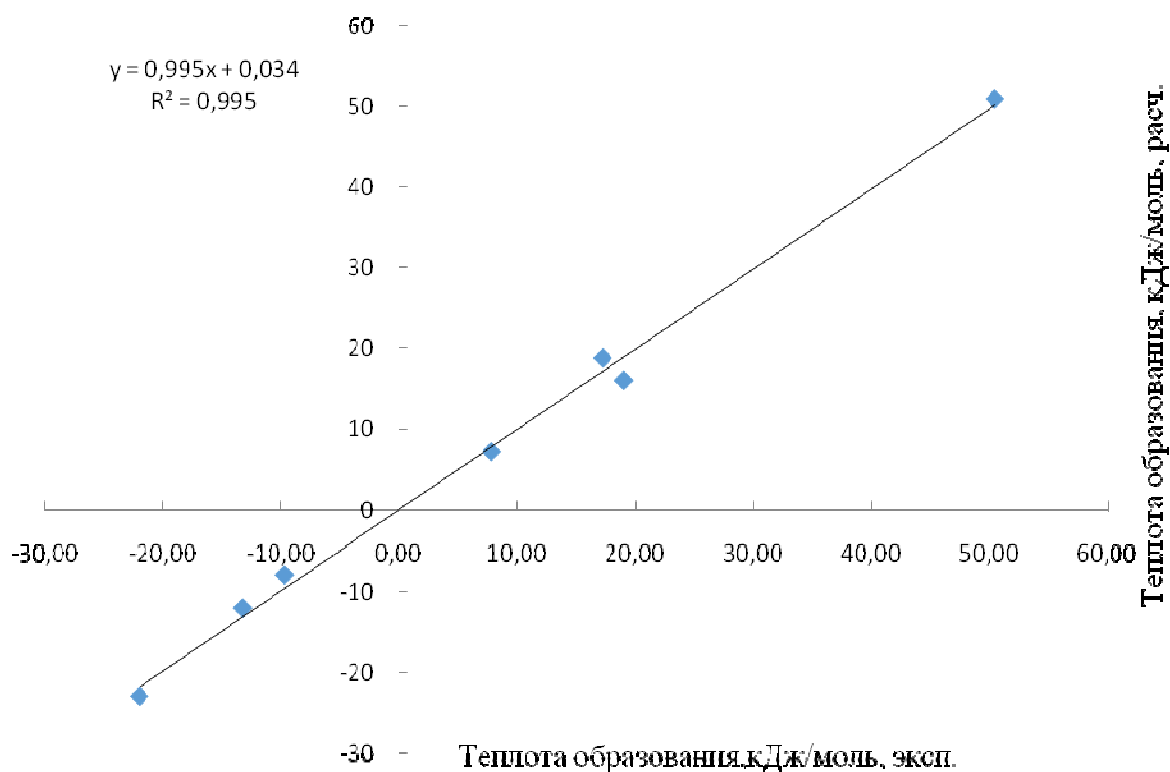


Рисунок 1 – Корреляция между экспериментальными и рассчитанными значениями теплоты образования алкилбензолов по молекулярным дескрипторам

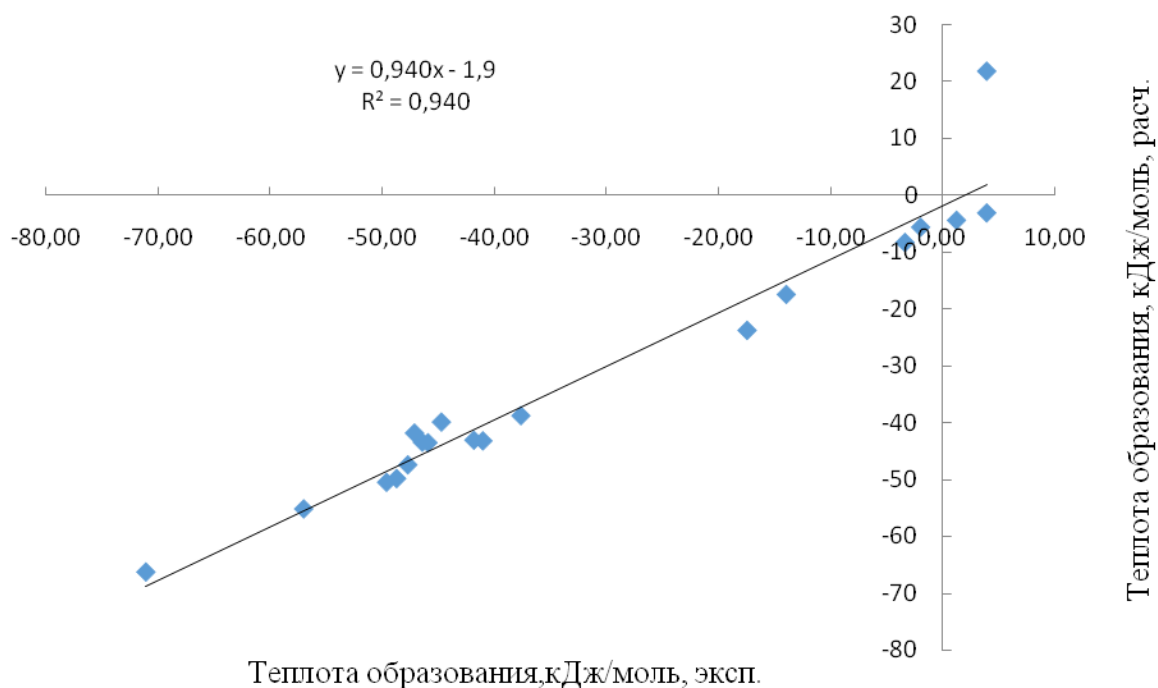


Рисунок 2 – Корреляция между экспериментальными и рассчитанными значениями теплоты образования алкилбензолов по молекулярным дескрипторам

На графиках некоторые точки выпадают, следует отметить, что для набора веществ по всей видимости не достоверны экспериментальные данные или отсутствуют структурные аналоги.

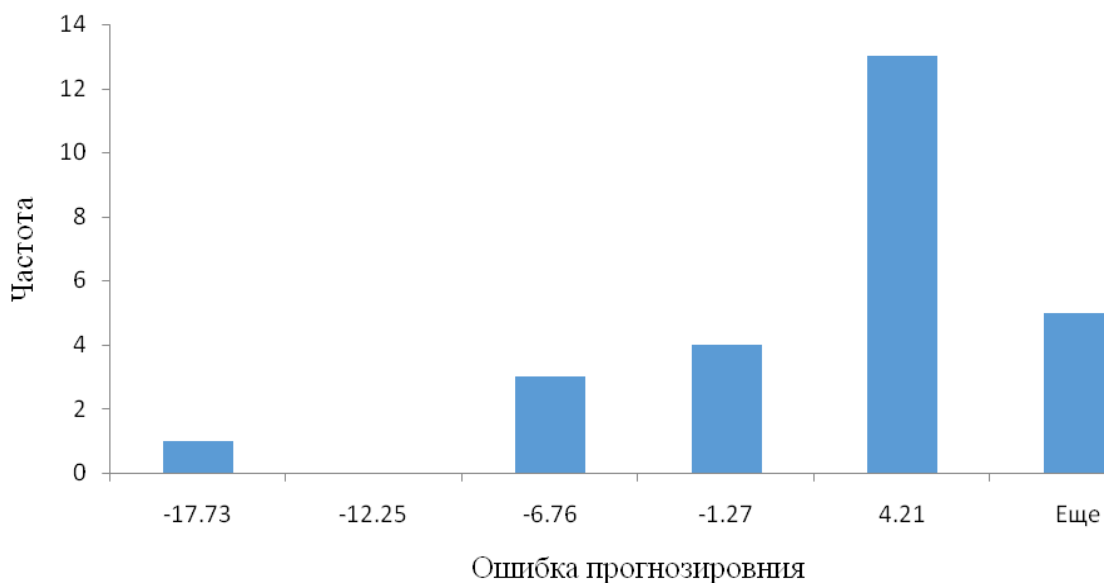


Рисунок 3 – Гистограмма распределения частот, ошибок прогнозирования теплоты образования алкилбензолов

Частота распределения прогнозирования отличается от нормального распределения, вероятно, это вызвано малой выборкой использованных экспериментальных данных. Причину такого распределения частоты можно объяснить тем, что первые члены гомологического ряда имеют большую разницу в экспериментальных и расчетных данных, вследствие малого количества изомеров [7, 8, 9].

Осуществив прогноз теплот образования алкилбензолов, можно провести определенный анализ полученных результатов исследования.

В работе Raouf Ghavami, Shadab Faham [3] для алкилбензолов был спрогнозирован набор из 30 веществ с коэффициентом корреляции между 0,9378 и 0,9673.

Качество прогнозирования для обычной модели без разделения на тренировочную и контрольную выборки характеризуется коэффициентом корреляции $R = 0,9518$ и стандартной ошибкой $s = 6,606$. В сравнении с литературными данными [4] можно видеть, что полученные нами результаты по статистическим параметрам не уступают качеству прогнозирования других авторов.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Estrada E, Uriate E. recent on the role of topological indices in drug discovery research.// *Curr.Med.Chem.*2001. –Vol.8.– P.1573 – 1588.

2. Wang Y.N, Chen J. W, Li X. H, Wang B, Cai X. Y, Huang L. P. Predicting rate constants of hydroxyl radical reactions with organic pollutants: Algorithm, validation, applicability domain, and mechanistic interpretation. // *Atmospheric Environment.*– 2009.– Vol. 43.– №5.–P. 1131–1135.

3. Raouf Ghavami, Shadab Faham. QSRR Models for Kováts' Retention Indices of a Variety of Volatile Organic Compounds on Polar and Apolar GC Stationary Phases Using Molecular Connectivity Indexes// November 2010, Volume 72, Issue 9–10, pp 893–903.

4. Thermal S., Madan A. K. Topological models for prediction of heat of decomposition of urea inclusion compounds containing aliphatic endocycles.// *Incl Phenom Macrocycl Chem.*– 2008.– Vol. 60.– P.187–192.

5. NIST Chemistry WebBook. NIST Standard Reference Database Number 69 – November 1998 Release. Режим доступа: <http://webbook.nist.gov/chemistry/>

6. Yaws' Handbook of Thermodynamic and Physical Properties of Chemical Compounds / CARL L. YAWS, ed. – New York, Norwich.

7. Соловьев М. Е., Соловьев М. М. Компьютерная химия. – М.: СОЛОН–пресс, 2005, –536 с.

8. Оценка и использование дескрипторов ВСИТ в исследованиях QSAR и QSPR // *Химия: РЖ.*–1999. – №20.–№ 20Б1117. – Реф.: Estimation and use of descriptors VSIT in researches QSAR and QSPR / Stanton David T. // *Chem. Inf. And Comput. Sci.* –1999.–39, №1.

9. ChemSpider. Режим доступа: <http://www.chemspider.com/>

Компьютерное прогнозирование теплоемкости алканов

Авторы: Самсонок Е.А., Тулегенова М.М.

Научные руководители: Важев В.В., Губенко М.А.

Костанайский государственный педагогический институт

При расчетах тепловых устройств очень важным моментом является определение количества теплоты, участвующего в процессах. Точное его определение обеспечивает правильную оценку работы аппарата с технической и экономической точки зрения.

Сообщение телу теплоты вызывает изменение его состояния и в общем случае сопровождается изменением температуры. Было замечено, что для нагрева до одной и той же температуры двух различных тел одинаковой массы и в одинаковых условиях требуется различное количество теплоты. Следовательно, существует какое-то свойство тела, определяющее изменение его температуры в процессе подвода или отвода теплоты. Это свойство называют теплоемкостью тела.

Теплоемкость – физическая величина, определяющая отношение бесконечно малого количества теплоты δQ , полученного телом, к соответствующему приращению его температуры dT : $C = \frac{\delta Q}{dT}$ (единица измерения теплоемкости в системе СИ– Дж/К).

Практическое значение исследования теплоемкости важно для расчетов энергетических балансов процессов в химических реакторах и других аппаратах химического производства, а также для выбора оптимальных теплоносителей. Экспериментальное измерение теплоемкости для разных интервалов температур – от предельно низких до высоких – является основным методом определения термодинамических свойств веществ. Особо следует подчеркнуть роль теплоемкости в структурных исследованиях индивидуальных веществ в конденсированном состоянии и растворов. В биохимии политермические измерения теплоемкости дают информацию о структурных переходах в белках.

Экспериментальное определение теплоемкости осуществляется с помощью дорогостоящих калориметрических методов, а экспериментальные данные разбросаны по трудно доступной литературе, причем эти данные в различных источниках часто сильно отличаются. Поэтому особое внимание в последние годы уделяется развитию расчетных методов определения различных свойств веществ, позволяющих обойти экспериментальные проблемы. Наиболее признанным является метод QSPR (Quantitative Structure– Property Relationships), связывающий дескрипторы молекулярной структуры со свойствами химического соединения.[1–5]

Нами было выполнено моделирование изобарной теплоемкости алканов с использованием дескрипторов, генерируемых программой Dragon.