

## Прогноз относительной плотности аминов и нитрилов.

Рукавишников В.В., Белик А.В.  
Челябинский Государственный Университет  
Челябинск, Россия  
[vladimir\\_rukavis@mail.ru](mailto:vladimir_rukavis@mail.ru)

Органические соединения, содержащие в своей структуре amino- и циано- группы, широко используются на практике и имеют определенный научный интерес [1]. В связи с этим, важное значение имеют теоретические исследования, позволяющие прогнозировать их некоторые физико-химические свойства, как функции молекулярного строения.

В настоящей работе предлагается рассмотреть относительную плотность ( $d_4^{20}$ ) соединений в рамках нового подхода к оценке молекулярной формы и объема органических соединений [2,3]. Для этого необходимо знание декартовых координат всех атомов, образующих молекулу. Определить их можно различными способами. К настоящему времени наибольшее распространение получил способ оптимизации геометрии в рамках квантовохимических приближений. Поэтому мы выбрали модель РМЗ [4], реализованную в программном комплексе "Hyper Chemistry". Далее каждому типу атомов в молекуле (химическому элементу) приписывается собственный атомный радиус ( $r^0$ ), являющийся параметром модели. В качестве  $r^0$  для атома водорода предлагается величина равная 0,3325 ангстрем, для атома углерода - 0,6500 ангстрем, для атома азота - 0,6775 ангстрем. Предполагается, что в результате атом-атомного взаимодействия в молекуле полученные сферические оболочки атомов деформируются. На первом этапе вычисляется величина  $\Delta r^0$  для каждого из атомов. Для этого просматриваются все его соседи на валентных и невалентных расстояниях. Для атомов, находящихся на валентных расстояниях,  $\Delta r^0$  вычисляется по формуле (1), где  $R_{i\mu}$  евклидово расстояние между атомами  $i$  и  $\mu$ ;  $n$  – главное квантовое число атома  $\mu$ . Для невалентных расстояний применяется формула (2).

$$r r_i = r_\mu^0 \exp (R_{i\mu}) / R_{i\mu}^{n-1} \quad (1)$$

$$r r_i = - r_\mu^0 \exp (R_{\mu j}) / R_{\mu j}^6 - r_\mu^0 \exp (R_{\mu j}) / R_{\mu j}^{12} \quad (2)$$

Механизм трансформации исходной сферической атомной оболочки может быть различным. В частности, для каждой рассматриваемой атомной пары сферическая форма атома преобразуется в эллиптическую, где полуосями эллипсоида выступают  $r^0$ ,  $r^0$  и  $(r^0 + \Delta r^0)$ . Затем формируется их суперпозиция из числа имеющих место взаимодействий. В результате получается новая форма молекулы, где атомы, ее образующие, не имеют сферической симметрии. Молекулярный объем находится для полученной фигуры численно в результате вписывания ее в параллелепипед, «нарезки» его на  $N$  частей по всем осям и оценки полученных «элементарных» объемов на принадлежность к молекуле. Их сумма и определяет искомую величину, а задание  $N$  – точность оценки объема. При расчете относительной плотности вещества использовался коэффициент упаковки, равный 0.6022.

В таблице приведены экспериментальные и вычисленные относительные плотности ряда соединений. Анализ полученных результатов показывает удовлетворительное согласие опытных и расчетных данных. Среднее отклонение относительной плотности составляет 0,0073.

Таблица. Экспериментальные  $d_4^{20}$ (эксп.) [5] и вычисленные  $d_4^{20}$ (расч.) относительные плотности органических соединений.

Соединения	$d_4^{20}$ (эксп.)	$d_4^{20}$ (расч.)
ацетонитрил	0,7830	0,8343
бутиламин	0,7420	0,7087
бутиронитрил	0,7960	0,7751
валеронитрил	0,8010	0,7631
гексиламин	0,7630	0,7046
диметиламин	0,6800	0,7067
диэтиламин	0,7110	0,7039
изобутиронитрил	0,7730	0,7753
метиламин	0,7690	0,7082
пропиламин	0,7140	0,7052
пропионитрил	0,7830	0,7977
триметиламин	0,6710	0,7069
этиламин	0,7060	0,7079

Таким образом, предложенная модель позволяет получить новую пространственную форму молекулы и достоверно оценить относительную плотность вещества.

#### Литература

1. Общая органическая химия / Под ред. Д.Бартона., У.Д.Оллиса. М.: Химия. Т.3. Азотсодержащие соединения. 1982. 736с.
2. Рукавишников В.В., Белик А.В. Вестн. Челяб. ун-та. Сер. 4. Химия. 2004. №1. С. 44-45.
3. Рукавишников В.В., Белик А.В. Моделирование пространственной формы органических соединений // Современные наукоемкие технологии. -М.: «Академия естествознания». 2005. № 9. С.103-105.
4. Stewart, J.J.P. Optimization of Parameters for Semiempirical Methods. I. //J.Comput.Chem.1989.№ 10. P.209.
5. Свойства органических соединений. Справочник / Под ред. А. А. Потехина. Л.: Химия, 1984. 520 С.