

## ТЕОРИЯ ГРАФОВ В КОРРЕЛЯЦИЯХ “СТРУКТУРА – СВОЙСТВО”

© 2016 г. М. Г. Виноградова, Ю. А. Федина, Ю. Г. Папулов

Тверской государственный университет

E-mail: mgvinog@mail.ru, fedina\_yuliya@yahoo.com, papulov\_yu@mail.ru

Поступила в редакцию 25.03.2015 г.

Обсуждены возможности теоретико-графового подхода в построении и интерпретации аддитивных схем расчета и прогнозирования. Выведены рабочие формулы для расчета термодинамических свойств алканов и их замещенных. По полученным схемам проведены численные расчеты некоторых термодинамических свойств хлоралканов, согласующиеся с экспериментом.

**Ключевые слова:** молекулярные графы, топологические индексы, энтальпия образования, численные расчеты.

DOI: 10.7868/S0044453716020345

В настоящее время топологические индексы (ТИ) широко используются в изучении корреляций “структура – свойство”. Некоторые из них были рассмотрены нами ранее [1–6]. Цель данного исследования – теоретико-графовое изучение корреляций “структура – свойство” алканов и их замещенных.

*Генерирование и систематизация изомеров*

Изучение какого-либо класса химических объектов полезно начинать с систематики этих объектов. При этом важно знать не только общее число членов данного ряда (их перечень), но и вид и число изомеров.

Химические изомеры как *комбинаторные графические объекты* изучаются методами теории перечисления графов. Первые подсчеты числа изомерных алканов и алкильных монорадикалов (спиртов) были осуществлены А. Кэли [3] (на базе его теории деревьев). В дальнейшем его расчеты были уточнены и распространены на другие классы соединений.

На языке теории графов алканы  $C_nH_{2n+2}$  представляют собой деревья. Теория перечисления графов (через производящую функцию, или перечисляющий ряд) позволяет вычислить:

1) *общее число деревьев с  $n$  вершинами ( $t_n$ );*

2) *число химических деревьев ( $N_n$ ), у которых степени вершин не превышают 4, – число структурных изомеров алканов<sup>1</sup> (табл. 1);*

3) *число корневых деревьев – деревьев с выделенной вершиной (корнем), а также число корне-*

вых деревьев с ограничениями на некорневые вершины (изомерных алкильных монорадикалов) и т.д.

Из данных табл. 1 видно, что существуют шесть деревьев с шестью вершинами, но пять изомерных гексанов; 11 деревьев с семью вершинами, но девять изомерных гептанов и т.п.

*Феноменологическая теория*

С феноменологической точки зрения молекула выступает как *система взаимодействующих атомов*. Принимая эту *физическую модель* молекулы, естественно предположить, что некоторое (экстенсивное) свойство вещества  $P$  может быть

**Таблица 1.** Число деревьев ( $t_n$ ) и деревьев-алканов ( $N_n$ )

$n$	$t_n$	$N_n$	$N$	$t_n$	$N_n$
1	1	1	13	1301	802
2	1	1	14	3159	1858
3	1	1	15	7741	4347
4	2	2	16	19320	10359
5	3	3	17	48629	24894
6	6	5	18	123867	60523
7	11	9	19	317955	148284
8	23	18	20	823065	366319
9	47	35	21	2144505	910726
10	106	75	22	5623756	2278658
11	235	159	23	14828074	5731580
12	551	355	24	39299897	14490245
			25	104636890	36797588

<sup>1</sup> Для высших алканов [7].

Таблица 2. Топологические индексы сорока первых алканов

№	Соединение	$p_1$	$p_2$	$p_3$	$p_4$	$p_5$	$p_6$	$R$	$W$	$Z$	$\chi$	МТИ
1	Метан	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0
2	Этан	1	0	0	0	0	0	0	1	2	1.000	4
3	Пропан	2	1	0	0	0	0	0	4	3	1.414	16
4	<i>n</i> -Бутан	3	2	1	0	0	0	0	10	5	1.914	38
5	2-Метилпропан	3	3	0	0	0	0	1	9	4	1.732	36
6	<i>n</i> -Пентан	4	3	2	1	0	0	0	20	8	2.414	74
7	2-Метилбутан	4	4	2	0	0	0	1	18	7	2.270	68
8	2,2-Диметилпропан	4	6	0	0	0	0	4	16	5	2.000	64
9	<i>n</i> -Гексан	5	4	3	2	1	0	0	35	13	2.914	128
10	2-Метилпентан	5	5	3	2	0	0	1	32	11	2.770	118
11	3-Метилпентан	5	5	4	1	0	0	1	31	12	2.808	114
12	2,2-Диметилбутан	5	7	3	0	0	0	4	28	9	2.561	106
13	2,3-Диметилбутан	5	6	4	0	0	0	2	29	10	2.643	108
14	<i>n</i> -Гептан	6	5	4	3	2	1	0	56	21	3.414	204
15	2-Метилгексан	6	6	4	3	2	0	1	52	18	3.270	190
16	3-Метилгексан	6	6	5	3	1	0	1	50	19	3.308	182
17	3-Этилпентан	6	6	6	3	0	0	1	48	20	3.346	174
18	2,2-Диметилпентан	6	8	4	3	0	0	4	46	14	3.061	170
19	2,3-Диметилпентан	6	7	6	2	0	0	2	46	17	3.181	168
20	2,4-Диметилпентан	6	7	4	4	0	0	2	48	15	3.126	176
21	3,3-Диметилпентан	6	8	6	1	0	0	4	44	16	3.121	162
22	2,2,3-Триметилбутан	6	9	6	0	0	0	5	42	13	2.943	156
23	<i>n</i> -Октан	7	6	5	4	3	2	0	84	34	3.914	306
24	2-Метилгептан	7	7	5	4	3	2	1	79	29	3.770	288
25	3-Метилгептан	7	7	6	4	3	1	1	76	31	3.808	276
26	4-Метилгептан	7	7	6	5	2	1	1	75	30	3.808	272
27	3-Этилгексан	7	7	7	5	2	0	1	72	32	3.846	260
28	2,2-Диметилгексан	7	9	5	4	3	0	4	71	23	3.561	260
29	2,3-Диметилгексан	7	8	7	4	2	0	2	70	27	3.681	254
30	2,4-Диметилгексан	7	8	6	5	2	0	2	71	26	3.664	258
31	2,5-Диметилгексан	7	8	5	4	4	0	2	74	25	3.626	270
32	3,3-Диметилгексан	7	9	7	4	1	0	4	67	25	3.621	244
33	3,4-Диметилгексан	7	8	8	4	1	0	2	68	29	3.719	246
34	2-Метил-3-этилпентан	7	8	8	5	0	0	2	67	28	3.719	242
35	3-Метил-3-этилпентан	7	9	9	3	0	0	4	64	28	3.682	232
36	2,2,3-Триметилпентан	7	10	8	3	0	0	5	63	32	3.481	230
37	2,2,4-Триметилпентан	7	10	5	6	0	0	5	66	19	3.417	242
38	2,3,3-Триметилпентан	7	10	9	2	0	0	5	62	23	3.504	226
39	2,3,4-Триметилпентан	7	9	8	4	0	0	3	65	24	3.553	236
40	2,2,3,3-Тетраметилбутан	7	12	9	0	0	0	8	58	17	3.250	214

Обозначения:  $p_l$  – числа путей длины  $l = 1, 2, 3, 4, 5, 6$ ;  $R$  – число троек смежных ребер, имеющих общую вершину;  $W$  – число Винера,  $Z$  – индекс Хосойи,  $\chi$  – индекс связности Рандича, МТИ – молекулярный топологический индекс Шульца. В [5, 6] эти индексы приведены для всех 35 нонанов и всех 75 деканов (для низших алканов дан расширенный набор ТИ).

представлено как сумма свойств, приходящихся на отдельные атом-атомные взаимодействия: однокцентровые ( $p_\alpha$ ), двухцентровые – парные ( $p_{\alpha\beta}$ ), трехцентровые – тройные ( $p_{\alpha\beta\gamma}$ ) и т.д. [3]:

$$P = \sum_n p_\alpha + \sum_{\alpha\beta} p_{\alpha\beta} + \sum_{\alpha\beta\gamma} p_{\alpha\beta\gamma} + \dots \quad (1)$$

$N$	$N_n$
30	4111846763
40	62481801147341
50	1117743651746953270
60	22158734535770411074184
70	471484798515330363034639871
80	10564476906946675106953415600016
90	2462451502428214396323044759956113295
100	5921072038125809849884993369103538010139

(математическая модель). Суммирование здесь производится по всем атомам, их парам, тройкам и т.п. Взаимодействия атомов в молекуле разделяются на валентные и невалентные.

Уравнение (1) охватывает разные физические свойства: *скалярные* (например, энтальпия образования), *векторные* (электрический дипольный момент) и *тензорные* (поляризуемость, магнитная восприимчивость) как в газовой и жидкой фазах, так, вообще говоря, и в твердом состоянии. Оно имеет *квантово-механическое и статистическое обоснование* [8–10] и в принципе допускает прямые расчеты (которые в общем случае весьма трудоемки).

В феноменологическом подходе для алканов из (1) следует [3, 4]:

$$P_{C_nH_{2n+2}} = a + bn + x_{cc_1}\Gamma_{cc} + x_{ccc_1}\Delta_{ccc} + x_{cc_2}\tau_{cc} + x_{cc_3}\omega_{cc} + x_{cc_4}\nu_{cc} + x_{cc_5}\mu_{cc} + x_{cc_6}o_{cc} + \dots \quad (2)$$

Здесь  $a$  и  $b$  представляют валентную часть,  $\Gamma_{cc}$  и  $\Delta_{ccc}$  – эффективные невалентные взаимодействия соответственно пары и тройки атомов С около одного и того же углеродного атома;  $\tau_{cc}$ ,  $\omega_{cc}$ ,  $\nu_{cc}$ ,  $\mu_{cc}$ ,  $o_{cc}$ , ... – эффективные невалентные взаимодействия пар атомов С, удаленных соответственно через два, три, четыре, пять и шесть атомов углерода и т.д.;  $x_{cc_1}$ ,  $x_{ccc_1}$ ,  $x_{cc_2}$ ,  $x_{cc_3}$ , ... – числа соответствующих взаимодействий.

Формула (2) обобщает известные схемы *Фаянса*, *Цана*, *Аллена* и др.

#### Топологические индексы

Предложено много ТИ, из них наиболее известны индексы *Винера* (1947), *Хосойи* (1971),

*Рандича* (1975), *Балабана* (1982), *Шульца* (1989), *Харари* (1991) и др. Не все из них имеют ясный физический смысл и равноценны по своей корреляционной способности со свойствами.

К числу важных ТИ относятся  $p_l$  – числа путей длины  $l = 1, 2, 3, \dots$  (иначе – числа пар вершин, разделенных  $l$  ребрами);  $R$  – число троек смежных ребер, имеющих общую вершину, и т.д. (см. табл. 2). Из других ТИ отметим:

1. *Число Винера* ( $W$ ), определяемое как полусумма элементов матрицы расстояний рассматриваемого графа:

$$W = (1/2) \sum_{\sigma, \rho=1}^n d_{\sigma\rho} + p_1 + 2p_2 + 3p_3 + \dots$$

2. *Индекс Хосойи* ( $Z$ ) определяется как число способов, которыми в графе  $G$  можно выбрать  $k$  ребер, не имеющих попарно общих концов:

$$Z = \sum_k P(G, k).$$

По определению,  $P(G, 0) = 1$ ,  $P(G, 1) = m$  – число ребер.

3. *Индекс Рандича* ( $\chi$ ), известный как индекс молекулярной связности первого порядка ( ${}^1\chi$ ), выражается

$$\chi = \sum_{\sigma, \rho} (r_\sigma r_\rho)^{-1/2}.$$

Здесь  $r_\sigma$  и  $r_\rho$  – степени вершин  $\sigma$  и  $\rho$ , образующих ребро.

4. *Молекулярный топологический индекс* (МТИ) *Шульца* определяется как сумма элементов матрицы

$$\nu(A + D),$$

где  $A$  и  $D$  – матрицы смежности и расстояний, а  $\nu$  – матрица-строка степеней вершин.

Числа взаимодействий скелетных атомов в (2) можно выразить через топологические индексы  $p_l$  и  $R$  как:

$$x_{cc_0} = p_1, \quad x_{cc_1} = p_2, \quad x_{ccc_1} = R, \\ x_{cc_2} = p_3, \quad p_4 = x_{cc_3}, \dots$$

Важной характеристикой ТИ является их дискриминирующая способность (пригодность различать изомеры).

Так, углеродное число  $n$  и индексы, выражающиеся через  $n$  (например,  $p_1 = n - 1$ ), имеют малую дискриминирующую способность (высокое вырождение), так как совсем не различают изомерные алканы (табл. 2).

Индексы  $p_2$  и  $R$  различают изомерные бутаны и пентаны, частично – гексаны, гептаны, октаны и

Таблица 3. Параметры схем и результаты расчета ряда термодинамических свойств хлоралканов

Параметр	$\Delta_f H^\circ(\text{г}, 298 \text{ К}),$ кДж/(моль К)	$S^\circ(\text{г}, 298),$ Дж/моль	$\Delta_f G^\circ(\text{г}, 298),$ кДж/моль	$C_p^\circ(\text{г}, 298),$ Дж/(моль К)
$a_0$	-16.178	44.553	-14.314	6.903
$b$	10.413	-28.374	46.413	9.946
$C$	-33.904	99.081	-16.970	20.044
$\Gamma_{CC}$	1.492	-21.490	-3.207	0.715
$\Gamma_{CX}$	-6.473	-18.674	-16.836	-0.927
$\Gamma_{XX}$	4.676	-15.620	-7.002	-2.035
$\Delta_{CCC}$	-5.741	-5.084	-2.263	0.038
$\Delta_{CCX}$	-4.732	9.892	1.118	1.160
$\Delta_{CXX}$	-0.223	7.284	9.145	2.431
$\Delta_{XXX}$	2.730	1.715	13.721	3.877
$\tau_{CC}$	1.805	-1.287	0.618	-1.517
$\tau_{CX}$	-1.486	13.929	-7.415	-2.725
$\tau_{XX}$	6.517	-0.930	6.945	0.084
$\omega_{CC}$	-2.136	5.689	-8.826	-0.049
$\omega_{CX}$	-2.778	-12.566	-7.170	-0.667
$\omega_{XX}$	-1.388	-15.306	-0.835	4.792
$ \bar{\epsilon} $	1.3	2.1	1.9	0.7
$\epsilon_{\max}$	-6.0	8.9	-5.0	$\pm 2.8$

т.д.; однако они не различают 2-метилпентан и 3-метилпентан между собой; 2,3-диметилпентан и 2,4-диметилпентан между собой и т.п. (табл. 2). Индексы  $p_3$  или  $\chi$ , различают изомерные пентаны, гексаны и гептаны; частично – октаны, нонаны и т.д.; однако не различают 3-метилгептан и 4-метилгептан между собой; 3,4-диметилгексан и 2-метил-3-этилпентан между собой и т.п. (табл. 2). Индексы  $p_4, p_5, \dots$ , еще более полно различают изомерные алканы.

Число Винера (см. табл. 2) не различает две пары гептанов (номера 17, 20 и 18, 19) и две пары октанов (28, 30 и 32, 34), индекс Хосойи – четыре пары октанов (24, 33; 28, 38; 31, 32 и 34, 35); индекс Рандича – две пары октанов (25, 26 и 33, 34); индекс Шульца – две пары октанов (26, 27 и 34, 37).

Наряду с топологическими (двумерными) индексами используются также трехмерные (топографические) индексы, учитывающие пространственное строение молекул.

#### Методология изучения связи “структура-свойство”

Она в теоретико-графовом подходе включает в себя следующие этапы [3–6].

1. Выбор объектов исследования (обучающая выборка) и анализ состояния численных данных по свойству  $P$  для данного круга соединений.

2. Отбор ТИ с учетом их дискриминирующей способности, корреляционной способности со свойствами и т.д.

3. Изучение графических зависимостей “свойство  $P$  – ТИ графа молекулы”, например,  $P$  от  $n$  – числа скелетных атомов и т.п.

4. Установление функциональной (аналитической) зависимости  $P = f(\text{ТИ})$ , в более общем случае,  $P = f(\text{ТИ}_1, \text{ТИ}_2, \dots)$  и определение (путем оптимизации) параметров в этих выражениях.

5. Численные расчеты  $P$ , сопоставление рассчитанных значений с экспериментальными.

Предсказание свойств еще не изученных и даже не полученных соединений (вне данной выборки).

#### Теория графов и аддитивные схемы

Аддитивные схемы расчета могут иметь теоретико-графовую интерпретацию. В таких схемах топологические индексы участвуют как числа параметров.

В теоретико-графовом подходе формула (2) принимает вид:

$$\begin{aligned}
 P_{C_n H_{2n+2}} &= a + bn + p_2 \Gamma_{CC} + \\
 &+ R \Delta_{CCC} + p_3 \tau_{CC} + p_4 \omega_{CC} = \\
 &= a_0 + p_1 b + p_2 \Gamma_{CC} + R \Delta_{CCC} + p_3 \tau_{CC} + p_4 \omega_{CC}
 \end{aligned}$$

Таблица 4. Результаты расчета энтальпий образования и энтропий ряда хлоралканов

№	Молекула	$\Delta_f H^\circ$ (г, 298 К), кДж/моль		$S^\circ$ (г, 298), Дж/(моль К)	
		Опыт	Расчет	Опыт	Расчет
1.	CH <sub>3</sub> Cl	-81.9 [11]	-82.4	234.6 [11]	232.7
2.	CH <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub>	-95.4 [11]	-95.5	270.3 [11]	271.6
3.	CHCl <sub>3</sub>	-102.7 [11]	-101.1	295.7 [11]	296.7
4.	CCl <sub>4</sub>	-95.7 [11]	-96.6	309.9 [11]	309.5
5.	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> Cl	-112.1 [11]	-110.9	275.8 [11]	274.8
6.	CH <sub>3</sub> CHCl <sub>2</sub>	-127.7 [11]	-130.6	305.1 [11]	302.3
7.	CH <sub>3</sub> CCl <sub>3</sub>	-144.6 [11]	-143.2	323.1 [11]	323.2
8.	CH <sub>2</sub> ClCH <sub>2</sub> Cl	-126.4 [11]	-128.5	308.4 [11]	309.7
9.	CH <sub>2</sub> ClCHCl <sub>2</sub>	-144.7 ± 1.9 [12]	-141.8	337.1 [11]	336.3
10.	CH <sub>2</sub> ClCCl <sub>3</sub>	-149.4 [11]	-147.8	355.9 [11]	356.3
11.	CHCl <sub>2</sub> CHCl <sub>2</sub>	-149.2 [11]	-148.5	362.7 [11]	362.0
12.	CHCl <sub>2</sub> CCl <sub>3</sub>	-142.0 [11]	-148.0	381.5 [11]	381.0
13.	CCl <sub>3</sub> CCl <sub>3</sub>	-143.6 [11]	-141.0	398.7 [11]	399.1
14.	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> Cl	-131.9 [11]	-132.8	319.1 [11]	328.0
15.	CH <sub>3</sub> CHClCH <sub>3</sub>	-144.9 [11]	-142.5	304.2 [11]	305.3
16.	CH <sub>3</sub> CHClCH <sub>2</sub> Cl	-162.8 [11]	-161.7	354.8 [11]	354.1
17.	CH <sub>3</sub> CCl <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	-173.2 [11]	-173.7	326.0 [11]	331.3
18.	(CH <sub>2</sub> Cl) <sub>2</sub> CH <sub>2</sub>	-159.2 [11]	-159.9	367.2 [11]	362.4
19.	(CH <sub>2</sub> Cl) <sub>2</sub> CHCl	-182.9 [11]	-182.2	382.9 [11]	387.7
20.	CH <sub>3</sub> CCl <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> Cl	-185.8 [11]	-186.3	382.9 [11]	379.2
21.	CH <sub>3</sub> (CH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> Cl	-154.6 [11]	-154.2	358.1 [11]	353.4
22.	CH <sub>3</sub> CHClCH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	-161.2 [11]	-162.6	359.6 [11]	357.1
23.	(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> CHCH <sub>2</sub> Cl	-159.4 [11]	-159.0	355.0 [11]	354.6
24.	(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> CCl	-182.2 [11]	-183.2	322.2 [11]	319.0
25.	CH <sub>3</sub> (CH <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> Cl	-175.0 [11]	-175.0	397.0 [11]	397.0
26.	(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> CHCH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> Cl	-179.7 [11]	-179.9	349.8 [13]	352.2
27.	(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> CClCH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	-202.2 [11]	-201.5	368.4 [13]	369.6

( $a_0 = a + b$ ,  $a = -p_{C-C} + 2p_{C-H} = 2p_H$ ,  $b = p_{CC} + 2p_{C-H} = p_C + 2p_H$ ) и т.д.

Аналогично для X-замещенных алканов (где X = F, Cl, Br, ...) имеем

$$P_{C_n H_{2n+2} X_n} = a_0 + p_1 b + p_1' c + p_2 \Gamma_{CC} + p_2' \Gamma_{CX} + p_2'' \Gamma_{XX} + R \Delta_{CCC} + R' \Delta_{CCX} + R'' \Delta_{CXX} + R''' \Delta_{XXX} + p_3 \tau_{CC} + p_3' \tau_{CX} + p_3'' \tau_{XX} + p_4 \omega_{CC} + p_4' \omega_{CX} + p_4'' \omega_{XX}.$$

Здесь  $a_0$  – число связей C–H;  $p_l$  – число путей длины 1, 2, ...,  $R, R', R'', R'''$  – число троек смежных ребер;  $b$  и  $c$  – число связей C–C и C–X;  $\Gamma_{CC}, \Gamma_{CX}, \Gamma_{XX}, \Delta_{CCC}, \Delta_{CCX}, \Delta_{CXX}, \Delta_{XXX}, \tau_{CC}, \dots$  – эффективные взаимодействия пар и троек рассмат-

риваемых атомов через один, два и т.д. атомов по цепи молекулы.

#### Численные расчеты

По данной схеме проведены численные расчеты энтальпии образования, энтропии, теплоемкости и энергии Гиббса. В табл. 3 приведены значения параметров оценки соответствующих свойств, средние абсолютные ошибки расчета  $|\bar{\epsilon}|$  и максимальные отклонения  $\epsilon_{\max}$ . В табл. 4 представлены результаты расчета энтальпии образования и энтропии ряда хлоралканов, а в табл. 5 – энергии Гиббса и теплоемкости.

Рассчитанные величины согласуются с экспериментальными и позволяют предсказать (в пределах ошибок опыта) недостающие значения свойств членов исследуемого ряда.

Таблица 5. Результаты расчета энергий Гиббса и теплоемкости ряда хлоралканов

№	Молекула	$\Delta_f G^\circ(\text{г}, 298)$ , кДж/моль		$C_p^\circ(\text{г}, 298)$ , Дж/(моль К)	
		Опыт	Расчет	Опыт [11]	Расчет
1.	CH <sub>3</sub> Cl	-58.5 [11]	-59.1	40.8	40.8
2.	CH <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub>	-68.9 [11]	-69.6	51.0	51.9
3.	CHCl <sub>3</sub>	-76.0 [11]	-72.5	65.7	64.8
4.	CCl <sub>4</sub>	-53.6 [11]	-55.0	83.4	83.5
5.	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> Cl	-60.5 [11]	-59.0	62.6	63.6
6.	CH <sub>3</sub> CHCl <sub>2</sub>	-73.8 [11]	-76.3	76.2	76.2
7.	CH <sub>3</sub> CCl <sub>3</sub>	-76.2 [11]	-77.8	93.3	93.1
8.	CH <sub>2</sub> ClCH <sub>2</sub> Cl	-73.9 [11]	-71.5	78.7	75.9
9.	CH <sub>2</sub> ClCHCl <sub>2</sub>	-77.5 [11]	-81.9	89.0	88.6
10.	CH <sub>2</sub> ClCCl <sub>3</sub>	-80.3 [11]	-76.5	102.7	105.5
11.	CHCl <sub>2</sub> CHCl <sub>2</sub>	-85.6 [11]	-85.4	100.8	101.3
12.	CHCl <sub>2</sub> CCl <sub>3</sub>	-70.3 [11]	-73.0	118.1	118.4
13.	CCl <sub>3</sub> CCl <sub>3</sub>	-54.9 [11]	-53.6	136.7	135.5
14.	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> Cl	-50.7 [11]	-51.8	84.6	85.3
15.	CH <sub>3</sub> CHClCH <sub>3</sub>	-62.5 [11]	-60.1	87.3	88.3
16.	CH <sub>3</sub> CHClCH <sub>2</sub> Cl	-83.1 [11]	-80.1	98.2	97.8
17.	CH <sub>3</sub> CCl <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	-84.6 [11]	-84.0	105.9	103.5
18.	(CH <sub>2</sub> Cl) <sub>2</sub> CH <sub>2</sub>	-82.6 [11]	-79.5	99.6	99.6
19.	(CH <sub>2</sub> Cl) <sub>2</sub> CHCl	-97.8 [13]	-100.9	—	112.2
20.	CH <sub>3</sub> CCl <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> Cl	-97.8 [11]	-97.0	112.2	113.2
21.	CH <sub>3</sub> (CH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> Cl	-38.8 [11]	-43.8	107.6	107.6
22.	CH <sub>3</sub> CHClCH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	-53.5 [11]	-52.3	108.5	108.5
23.	(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> CHCH <sub>2</sub> Cl	-49.7 [11]	-50.1	108.5	107.8
24.	(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> CCl	-64.1 [11]	-65.6	114.2	114.9
25.	CH <sub>3</sub> (CH <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> Cl	-37.4 [11]	-37.4	130.5	130.5
26.	(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> CHCH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> Cl	-43.7 [13]	-41.2	—	130.6
27.	(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> CClCH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	-56.5 [13]	-57.2	—	133.6

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Папулов Ю.Г., Чернова Т.И., Смоляков В.М. и др. // Журн. физ. химии. 1993. Т. 67. № 2. С. 203.
- Смоляков В.М., Папулов Ю.Г., Поляков М.Н. и др. // Там же. 1996. Т. 70. № 5. С. 787.
- Папулов Ю.Г., Виноградова М.Г. Расчетные методы в атом-атомном представлении. Монография. Тверь: ТвГУ, 2002. 232 с.
- Папулов Ю.Г., Виноградова М.Г. Математика и химия. Монография. Тверь: ТвГУ, 2007. 200 с.
- Виноградова М.Г., Папулов Ю.Г. Теоретико-графовые методы в химии. Учебное пособие. Тверь: Твер. гос. ун-т, 2013. 96 с.
- Виноградова М.Г., Папулов Ю.Г., Смоляков В.М. Количественные корреляции "структура—свойство" алканов. Аддитивные схемы расчета. Учебное пособие. Тверь: ТвГУ, 1999. 96 с.
- Папулов Ю.Г., Розенфельд В.Р., Кеменова Т.Г. Молекулярные графы. Тверь: ТвГУ, 1990. — 88 с.
- Татевский В.М. Теория физико-химических свойств молекул и веществ. М.: Изд-во МГУ, 1987. 239 с.
- Виноградова М.Г., Папулов Ю.Г., Смоляков В.М., Салтыкова М.Н. // Журн. физ. химии. 1996. Т. 70. № 4. С. 675–680.
- Смоляков В.М., Виноградова М.Г., Папулов Ю.Г. и др. // Там же. 1995. Т. 69, № 1. С. 162.
- Lange's Handbook of Chemistry / Editor: J.A. Dean. (15th Edition), McGraw-Hill. 1999. [Электронный ресурс]. URL: <http://fptl.ru/biblioteka/spravo4niki/dean.pdf> (дата обращения: 10.12.14).
- Колесов В.П., Папина Т.С. // Успехи химии. 1983. Т. 52, № 5. С. 754–776.
- Сталл Д., Вестрам Э., Зинке Г. Химическая термодинамика органических соединений. М.: Мир, 1971. 944 с.