

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ ИССЛЕДОВАНИЯ ТЕМПЕРАТУРНОЙ ЗАВИСИМОСТИ КОЭФФИЦИЕНТОВ ВЯЗКОСТИ И ПЛОТНОСТИ 1,4-БЕНЗОДИОКСАНА

¹М.Б. Акрамов, ²М. Бахтовар, ²И.О. Мирзода

¹ Центр инновационного развития науки и цифровых технологий НАНТ, Душанбе, Таджикистан

² Таджикский государственный педагогический университет имени С. Айни, Душанбе, Таджикистан

В статье представлены результаты исследования температурной зависимости коэффициентов динамической (η) и кинематической (ν) вязкостей, а также плотности (ρ) 1,4-бензодиоксана. Проведено экспериментальное изучение изменения характеристик соединения при различных температурных режимах. На основе полученных данных построены графические зависимости коэффициентов вязкости от температуры и выявлены закономерности их изменения. Для математического описания экспериментальных результатов применена аналитическая программа Sigma Plot, с помощью которой разработаны компьютерно-математические модели в виде регрессионных уравнений. Полученные уравнения позволяют прогнозировать значения вязкости 1,4-бензодиоксана при заданных температурах и могут быть использованы при расчёте технологических процессов. Результаты исследования представляют интерес для химии и медицины, где 1,4-диоксановое кольцо применяется при синтезе сложных и труднодоступных производных.

Ключевые слова: 1,4-бензодиоксан, нагрев, температура, вязкость, плотность, модель.

МОДЕЛИ КОМПЬЮТЕРИИ НАТИҶАҲОИ ТАҲҚИҚОТИ ВОБАСТАГИИ КОЭФФИЦИЕНТҲОИ ЧАСПАКИ ВА ЗИЧИИ 1,4-БЕНЗОДИОКСАН АЗ ҲАРОРАТ

¹М.Б. Акрамов, ²М. Бахтовар, ²И.О. Мирзода

¹ Маркази рушди инноватсионии илм ва технологияҳои рақамии АМИТ, ш. Душанбе, Ҷумҳурии Тоҷикистон

² Донишгоҳи давлатии омӯзгории Тоҷикистон ба номи С. Айни, ш. Душанбе, Ҷумҳурии Тоҷикистон

Дар мақола натиҷаҳои таҳқиқи вобастагии ҳароратии коэффитсиентҳои часпакии динамики (η) ва кинематикӣ (ν), инчунин зичии (ρ) 1,4-бензодиоксан пешниҳод шудаанд. Тағйирёбии хусусиятҳои пайвастагӣ дар шароити гуногуни ҳароратӣ ба таври таҷрибавӣ омӯхта шудааст. Дар асоси маълумоти бадастомада вобастагии графикии коэффитсиентҳои часпакӣ аз ҳарорат сохта шуда, қонуниятҳои тағйирёбии онҳо муайян карда шуданд. Барои тавсифи математикии натиҷаҳои таҷрибавӣ барномаи таҳлилии Sigma Plot истифода гардида, бо ёрии он моделҳои компютерӣ-математикӣ дар шакли муодилаҳои регрессионӣ таҳия карда шуданд. Муодилаҳои бадастомада имконият медиҳанд, ки қиматҳои часпакии 1,4-бензодиоксан дар ҳароратҳои муайян пешгӯӣ карда шуда, хангоми ҳисобкунии равандҳои технологӣ истифода шаванд. Натиҷаҳои таҳқиқот барои соҳаҳои химия ва тиб аҳамияти илмӣ ва амалӣ доранд, ки дар онҳо ҳалқаи 1,4-диоксанӣ хангоми синтези ҳосилаҳои мураккаб ва душвордастраси он истифода мегардад.

Калимаҳои калидӣ: 1,4-бензодиоксан, гармӣ, ҳарорат, часпакӣ, зичӣ, модел.

COMPUTER SIMULATION OF THE RESULTS OF THE RESEARCH OF THE TEMPERATURE DEPENDENCE OF THE VISCOSITY AND DENSITY COEFFICIENTS OF 1,4-BENZODIOXANE M. B. Akramov, M. Bakhtovar, I.O. Mirzoda

¹ Center for Innovative Development of Science and Digital Technologies, NAST, Dushanbe, Tajikistan

² Tajik State Pedagogical University named after S. Aini, Dushanbe, Tajikistan

The article presents the results of a study on the temperature dependence of the dynamic (η) and kinematic (ν) viscosity coefficients, as well as the density (ρ) of 1,4-benzodioxane. An experimental investigation of changes in the characteristics of the compound under different temperature conditions was carried out. Based on the obtained data, graphical dependences of viscosity coefficients on temperature were constructed, and the regularities of their variation were determined. For the mathematical description of the experimental results, the analytical program SigmaPlot was applied, using which computer-mathematical models in the form of regression equations were developed. The obtained equations make it possible to predict the viscosity values of 1,4-benzodioxane at specified temperatures and can be used in the calculation of technological processes. The results of the study are of interest for chemistry and medicine, where the 1,4-dioxane ring is used in the synthesis of complex and difficult-to-access derivatives.

Keywords: 1,4-benzodioxane, heating, temperature, viscosity, density, model.

Введение

Бензо-1,4-диоксан (1,4-бензодиоксан) – это бесцветная жидкость со слабым специфическим запахом. Хорошо растворяется в органических растворителях.

1,4 – бензодиоксан с давних пор применяется в фармацевтике и фармакологии. В медицине 1,4 -бензодиоксан и его производные применяется для производства лекарств. Полученные биологически активные лекарственные средства медики назначают для лечения онкологических,

антидепрессивных, нейролептических и противогипертоических средств для больных. Встречаются работы, в которых производные препарата применены в сельском хозяйстве как гербициды. Исходя из этого, можно подтвердить слова К. Болки «1,4-бензодиоксан, вечнозеленый, универсальный каркас в медицинской химии» [1 – 7].

Из рассмотренных литературных источников известно, что плотность 1,4 - бензодиоксана при комнатной температуре равна $1,142 \pm 0,1 \text{ г / см}^3$. Исследуемый объект относится к ньютоновским жидкостям, то есть обладает присущей им вязкостью, которая не меняется при изменении силы, приложенной к жидкости. Эту характеристическую вязкость можно легко и точно измерить с помощью прибора капиллярного типа, использующего гравитацию для перемещения жидкости. Хотя производные 1,4 - бензодиоксана синтезированы многими авторами и изучены химические характеристики, но их вязкостные характеристики в зависимости от температуры изучены недостаточно широко и желают уточнения. В связи с этим нами исследованы температурные зависимости вязкостных характеристик 1,4-бензодиоксана.

Материалы и методы исследования

Объектом исследования является 1,4-бензодиоксан, синтезированный учеными Института химии им. В. И. Никитина Академии наук Республики Таджикистан [8].

Измерения проводились в лаборатории «Теплотехника» кафедры «Экспериментальная физика» физического факультета Таджикского государственного педагогического университета имени С. Айни. Для измерения плотности применен метод гидростатического взвешивания, а для измерения вязкостных характеристик 1,4-бензодиоксана вискозиметрический метод (вискозиметры Освальда). Комплексная установка по определению реологических, вязкостных и оптических характеристик жидкостей на базе водяного термостата разработана работниками лаборатории теплотехники. Установка по определению реологических, вязкостных и оптических характеристик жидкостей состоит из водяного термостата, заполненного трансформаторным маслом, установленного электродвигателя для перемешивания заполненной жидкости, ртутного термометра, электронных весов, кварцевого поплавка, лампочки, установленной на пробирке для освещения вискозиметра, груши для вискозиметра, рефрактометра ИРФ - 454 БН, капилляров с термостатирующей оболочкой для образования капель исследуемых жидкостей, штатива, мультиметра UNI - T, UT 72В, проводов для подключения мультиметра UNI - T, UT71В к компьютеру и ПЭВМ.

Блок – схема установки приведена на рис. 1.

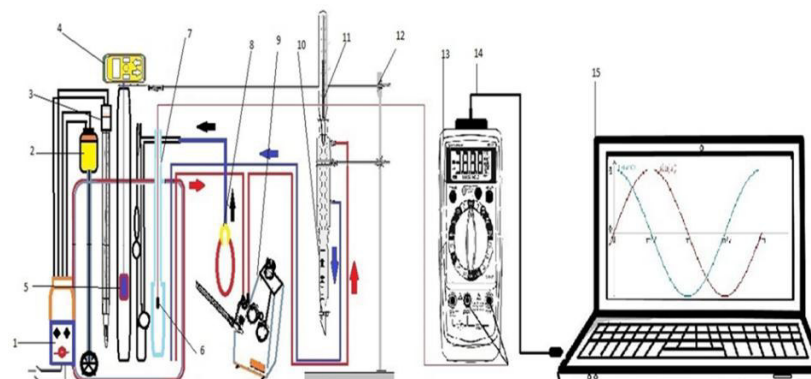


Рисунок 1 - Блок – схема комплексной установки по определению реологических, вязкостных и оптических характеристик жидкостей. 1-термостат водяной, заправленный трансформаторным маслом, 2- электродвигатель, 3- ртутный термометр, 4-электронные весы, 5-кварцевый поплавок, 6-лампочка, 7-пробирка, 8-груша для вискозиметра, 9- рефрактометр ИРФ - 454 БН, 10-капилляр для получения капель, 11-ртутный термометр, 12-штатив, 13-мультиметр UNI - T, UT71В, 14- оптический провод для подключения мультиметра к компьютеру, 15- ПЭВМ

Figure 1 – Block diagram of a complex setup for determining the rheological, viscosity, and optical characteristics of liquids.

1 – water thermostat filled with transformer oil; 2 – electric motor; 3 – mercury thermometer; 4 – electronic balance; 5 – quartz float; 6 – light bulb; 7 – test tube; 8 – rubber bulb for viscometer; 9 – IRF-454 BN refractometer; 10 – capillary for droplet formation; 11 – mercury thermometer; 12 – laboratory stand; 13 – UNI-T UT71B multimeter; 14 – optical cable for connecting the multimeter to a computer; 15 – personal computer (PC).

Принцип работы установки

Вискозиметр Освальда, пробирка для определения плотности методом гидростатического взвешивания, капилляр для образования капель под действием силы тяжести и предметный столик рефрактометра заправляется исследуемой жидкостью. Кварцевый поплавок устанавливают так, чтобы не прикасались к стенкам пробирки, электронными весами определяют массу поплавка в исследуемой жидкости при комнатной температуре. Измеряется вязкость жидкости, коэффициент поверхностного натяжения и показатель преломления по известным методикам при комнатной температуре. Программируя мультиметр UNI - T, UT71B по времени, подключаем режим нагрева. При фиксированных температурах (через 5 или 100 с.) определяются вязкость, коэффициент поверхностного натяжения, плотность и показатель преломления исследуемой жидкости. Все измерения проводятся в режиме охлаждения, так как при нагревании возникает градиент температуры между температурами жидкостей в термостате и анализируемой жидкостью.

Нами, применяя программу Sigma Plot, построены графики зависимостей и рассчитаны коэффициенты регрессионных уравнений зависимостей. Базой для поддержания температуры исследуемой жидкости является водяной термостат, заполненный трансформаторным маслом.

Результаты и обсуждения

Измеренные значения коэффициента вязкости и плотности 1,4-бензодиоксана от температуры приведены в таблице 1.

Таблица 1 - Измеренные значения коэффициента вязкости и плотности 1,4-бензодиоксана от температуры

Table 1 – Measured values of the viscosity coefficient and density of 1,4-benzodioxane as a function of temperature

Измеряемые величины	Измеренные значения коэффициентов								
Температура, К	295	304	316	327	335	347	354	366	373
Плотность, кг/м ³	1142	1110	1080	1060	1043	1023	1007	1001	996
Динамическая вязкость, η ($\times 10^{-6}$ Па с)	1003	862	794	757	727	694	673	661	656
Кинематическая вязкость, ν ($\times 10^{-6}$ м ² /с)	0,878	0,776	0,735	0,714	0,697	0,678	0,668	0,660	0,658

Из полученных данных эксперимента построены графики зависимости коэффициентов от температуры. «Полученные данные обработаны с помощью аналитической программы Sigma Plot» [9]. Зависимость коэффициента динамической вязкости 1,4 -бензодиоксана от температуры приведена на рис. 2. Кинематическая вязкость от температуры зависит, как показано на рис.3. По полученным результатам определены компьютерные модели, которые описываются регрессионными уравнениями третьего порядка.

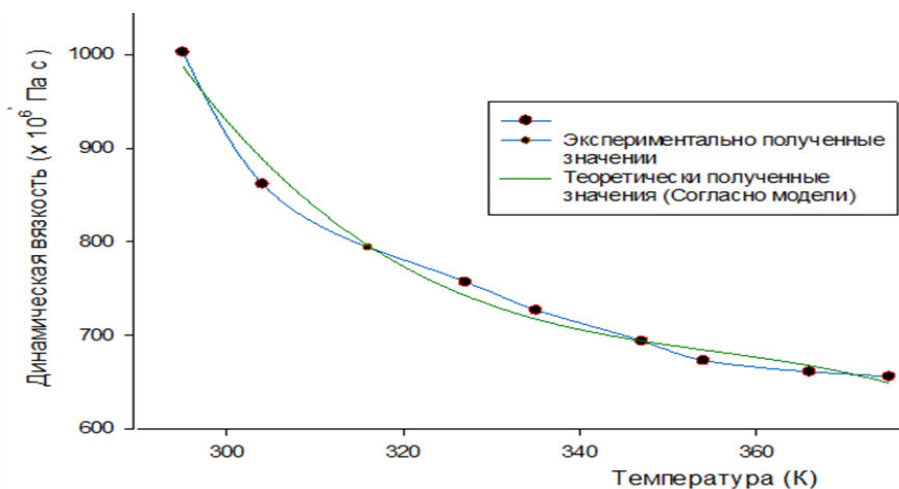


Рисунок 2 - Зависимость динамической вязкости 1,4-бензодиоксана от температуры. Сплошная кривая относится к расчётным значениям согласно модели

Figure 2 – Dependence of the dynamic viscosity of 1,4-benzodioxane on temperature. The solid curve corresponds to the calculated values according to the model

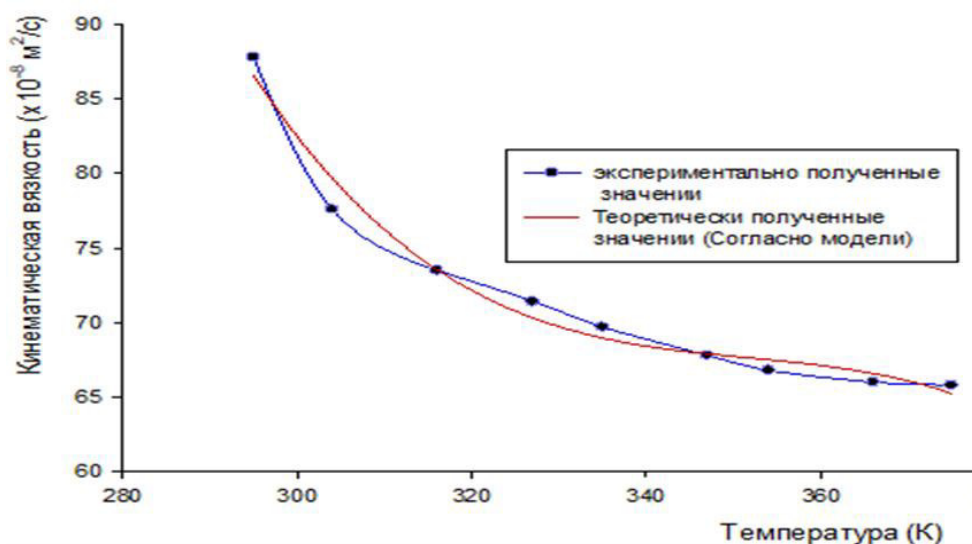


Рисунок 3 – Зависимость кинематической вязкости 1,4-бензодиоксана от температуры

Figure 3 – Dependence of the kinematic viscosity of 1,4-benzodioxane on temperature

Сплошная кривая относится расчётным значениям согласно модели.

Уравнение модели зависимости динамической и кинематической вязкости имеет вид:
для 1,4-бензодиоксана, динамическая вязкость.

$$\eta = y_0 + a \cdot t + b \cdot t^2 + c \cdot t^3 \quad (1)$$

Коэффициент регрессии $R = 0,9929$.

Для 1,4-бензодиоксана, кинематическая вязкость

$$\nu = y_0 + a \cdot t + b \cdot t^2 + c \cdot t^3 \quad (2)$$

Коэффициент регрессии $R = 0,9892$.

Значения коэффициентов регрессионных уравнений приведены в таблице 2.

Таблица 2 - Значения коэффициентов регрессионных уравнений

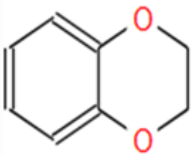
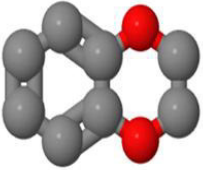
Table 2 – Values of the regression equation coefficients

Коэффициент	Отклонение	t	P
Для уравнения 1			
y_0	От 47990,9076 до 17259,3990	2,7806	0,0389
a	От -397,0902 до 155,4512	-2,5544	0,0510
b	От 1,1146 до 0,4652	2,3959	0,0619
c	От -0,0010 до 0,0005	-2,2616	0,0732
Для уравнения 2			
y_0	От 3864,1734 до 1331,9018	2,9012	0,0337
a	От -32,2747 до 11,9961	-2,6904	0,0433
b	От 0,0916 до 0,0359	2,5519	0,0512
c	От -8,6834E-005 до 3,5702E-005	-2,4322	0,0592

1,4-Бензодиоксан — гетероциклическое соединение, которое широко распространено и имеет важное значение в химии, медицине и других областях. Его производные образуются при замещении атомов водорода в бензольном кольце или других функциональных группах.

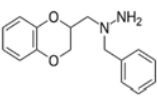
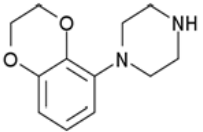
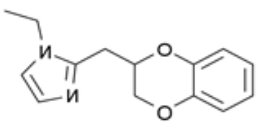
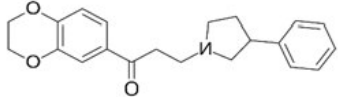
Структурная формула и 3Д-модель молекулы 1.4 – бензодиоксана приведены в таблице 3.

Таблица 3 - Структурная формула и 3D-модель молекулы 1,4 – бензодиоксана
 Table 3 – Structural formula and 3D model of the 1,4-benzodioxane molecule

Формула	Структурная формула 1,4-бензодиоксана	3D-модель 1,4-бензодиоксана
$C_8H_8O_2$		

Знание вязкостных характеристик 1,4-бензодиоксана от температуры необходимо для фармацевтов при синтезировании многих лекарственных препаратов. Для примера в таблице 4 приведены некоторые производные 1,4-бензодиоксана, которые используются в качестве фармацевтических препаратов, в том числе: демоксина, элтопризина, имолаксана и прораксана [10-12].

Таблица 4 - Производные 1,4-бензодиоксана
 Table 4 – Derivatives of 1,4-benzodioxane

Название препарата	Демоксин	Элтопризин	Имолаксан	Пророксан
Структурная формула				

Как видно из структурных формул, в основе всех перечисленных препаратов лежит 1,4 - бензодиоксан. Знание вязкостных свойств 1,4 -бензодиоксана облегчает работу фармацевтов, так как вязкость жидкости – это сопротивление перемещению одного слоя жидкости относительно другого слоя. Вязкость можно оценить при его движении, то есть, когда начинают действовать силы сцепления между молекулами.

Заключение

Анализируя полученные экспериментальные данные, можно заключить, что уменьшение коэффициента кинематической и динамической вязкости с повышением температуры обусловлено межмолекулярными взаимодействиями молекул 1,4-бензодиоксана, что поддерживает нахождение молекул в связанном состоянии в жидкости. При повышении температуры межмолекулярные силы притяжения уменьшаются, которые сопровождаются уменьшением вязкостных характеристик объекта исследования. При повышении температуры молекулы 1,4-бензодиоксана получают кинетическую энергию, достаточную для разрыва межмолекулярных связей. В результате этого потенциальная энергия межмолекулярного взаимодействия (силы притяжения) уменьшается.

Регрессионные уравнения моделей можно использовать в химии и медицине, где применяется 1,4 – диоксановое кольцо для синтеза его труднодоступных производных. Таким образом, при разработке и синтезировании медицинских препаратов на основе 1,4 – бензооксана необходимо учитывать его температурные коэффициенты вязкости.

Рецензент: Зубайдов С — д.э.н., к.т.н., доцент, заведующий отделом Возобновляемых источников энергии Центра инновационного развития науки и цифровых технологий НАНП.

Литература

1. Болки, К. 1,4-Бензодиоксан, вечнозеленый, универсальный каркас в медицинской химии: обзор его недавних применений в разработке лекарств / К. Болки, Ф. Баво, Р. Аппиани // Европейский журнал медицинской химии. – 2020. – Т. 200. – 112419. – С. 1–16.

2. The Use of Stems in the Selection of International Nonproprietary Names (INN) for Pharmaceutical Substances. – Geneva: WHO, 2011.
3. Straniero, V. Chirality / V. Straniero, A. Casiraghi, L. Fumagalli, E. Valoti. – 2018. – Vol. 30. – P. 943–950. – DOI: 10.1002/chir.22968.
4. Yin, X. Organic Letters / X. Yin, Y. Huang, Z. Chen, Y. Hu, L. Tao, Q. Zhao, X.-Q. Dong, X. Zhang. – 2018. – Vol. 20. – P. 4173–4177. – DOI: 10.1021/acs.orglett.8b01469.
5. Rezki, N. Molecules / N. Rezki, A.M. Al-Yahyawi, S.K. Bardaweel, F.F. Al-Blewi, M.R. Aouad. – 2015. – Vol. 20. – P. 16048–16067. – DOI: 10.3390/molecules200916048.
6. Nawrocka, W.P. Wiadomości Chemiczne / W.P. Nawrocka, A. Nowicka. – 2014. – Vol. 68. – P. 981–1008.
7. Авакян, А.С. Некоторые успехи органической и фармацевтической химии / А.С. Авакян, С.О. Вартанян, А.Б. Саргсян // Сборник трудов. – Ереван, 2017. – С. 49–58.
8. Турдиалиев, М.З. Синтез и химические превращения некоторых производных 1,4-бензодиоксана: диссертация / М.З. Турдиалиев. – Душанбе, 2019. – 107 с.
9. Мирон, И.О. Влияние кремния и легирования на механические свойства сплавов алюминия системы / И.О. Мирон // Политехнический вестник. Серия: Инженерные исследования. – 2023. – № 2(62). – С. 87–94.
10. Канюков, В.Н. Демодекоз глаз: проблемы и пути решения / В.Н. Канюков, В.К. Банников, Е.К. Мальгина // Офтальмохирургия. – 2015. – № 1. – С. 48–52.
11. Кузнецова, Е.Г. Влияние пренатального стресса на половое возбуждение и половую ориентацию самцов мышей / Е.Г. Кузнецова, Т.Г. Амстиславская, В.В. Булыгина, Н.К. Попова // Российский физиологический журнал им. И.М. Сеченова. – 2006. – Т. 92. – № 1. – С. 123–132.
12. Нифонтова, Г.О. Получение «плавающих» таблеток с пролонгированным высвобождением пропранолола / Г.О. Нифонтова, С.П. Кречетов, О.В. Долотова и др. // Фармация. – 2017. – № 1. – С. 37–41.

References

1. Bolki, K. 1,4-Benzodioxane, a Versatile and Universal Scaffold in Medicinal Chemistry: A Review of Its Recent Applications in Drug Discovery / K. Bolki, F. Bavo, R. Appiani // European Journal of Medicinal Chemistry. – 2020. – Vol. 200. – Art. 112419. – P. 1–16.
2. The Use of Stems in the Selection of International Nonproprietary Names (INN) for Pharmaceutical Substances. – Geneva: World Health Organization (WHO), 2011.
3. Straniero, V. Chirality / V. Straniero, A. Casiraghi, L. Fumagalli, E. Valoti. – 2018. – Vol. 30. – P. 943–950. – DOI: 10.1002/chir.22968.
4. Yin, X. Organic Letters / X. Yin, Y. Huang, Z. Chen, Y. Hu, L. Tao, Q. Zhao, X.-Q. Dong, X. Zhang. – 2018. – Vol. 20. – P. 4173–4177. – DOI: 10.1021/acs.orglett.8b01469.
5. Rezki, N. Molecules / N. Rezki, A.M. Al-Yahyawi, S.K. Bardaweel, F.F. Al-Blewi, M.R. Aouad. – 2015. – Vol. 20. – P. 16048–16067. – DOI: 10.3390/molecules200916048.
6. Nawrocka, W.P. Wiadomości Chemiczne / W.P. Nawrocka, A. Nowicka. – 2014. – Vol. 68. – P. 981–1008.
7. Avakyan, A.S. Some Advances in Organic and Pharmaceutical Chemistry / A.S. Avakyan, S.O. Vartanyan, A.B. Sargsyan // Proceedings. – Yerevan, 2017. – P. 49–58.
8. Turdialiev, M.Z. Synthesis and Chemical Transformations of Some 1,4-Benzodioxane Derivatives: Dissertation / M.Z. Turdialiev. – Dushanbe, 2019. – 107 p.
9. Miron, I.O. Effect of Silicon and Alloying on the Mechanical Properties of Aluminum System Alloys / I.O. Miron // Polytechnic Bulletin. Series: Engineering Research. – 2023. – № 2(62). – P. 87–94.
10. Kanyukov, V.N. Ocular Demodicosis: Problems and Solutions / V.N. Kanyukov, V.K. Bannikov, E.K. Maligna // Ophthalmosurgery. – 2015. – № 1. – P. 48–52.
11. Kuznetsova, E.G. Influence of Prenatal Stress on Sexual Arousal and Sexual Orientation of Male Mice / E.G. Kuznetsova, T.G. Amstislavskaya, V.V. Bulygina, N.K. Popova // Russian Journal of Physiology named after I.M. Sechenov. – 2006. – Vol. 92. – № 1. – P. 123–132.

12. Nifontova, G.O. Preparation of Floating Tablets with Prolonged Release of Proroxan / G.O. Nifontova, S.P. Krechetov, O.V. Dolotova et al. // Pharmacy. – 2017. – № 1. – P. 37–41.

МАЪЛУМОТ ДАР БОРАИ МУАЛЛИФОН - СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ - INFORMATION ABOUT THE AUTHORS

TJ	RU	EN
Акрамов Муҳаммад Бозорович	Акрамов Мухаммад Бозорович	Akramov Muhammad Bozorovich
н.и.ф.- м, дотсент	к.ф.- м.н., доцент	Candidate of Physico-mathematical Sciences, Associate Professor
Маркази рушди инноватсионии илм ва технологияҳои рақамии АМИТ	Центр инновационного развития науки и цифровых технологий НАНТ	Center for Innovative Development of Science and New Technologies
E-mail: akramov60@mail.ru		
ORCID: https://orcid.org/0000-0001-7155-7410		
TJ	RU	EN
Бахтовари Мирзовалӣ	Бахтовари Мирзовали	Bakhtovari Mirzovali
ассистенти кафедра	Ассистент кафедры	Assistant of the Department
Донишгоҳи давлатии педагогии Тоҷикистон ба номи С. Айни, кафедраи физикаи таҷрибавӣ	Таджикский государственный педагогический университет имени С. Айни, кафедра Экспериментальная физика	S. Aini Tajik State Pedagogical University, Department of Experimental Physics
	E-mail: bahtovarim@mail.ru	
TJ	RU	EN
Мирзода Ислон Ояхмад	Мирзода Ислон Ояхмад	Mirzoda Islom Oyakhmad
ассистенти кафедра	Ассистент кафедры	Assistant of the Department
Донишгоҳи давлатии педагогии Тоҷикистон ба номи С. Айни, кафедраи физикаи таҷрибавӣ	Таджикский государственный педагогический университет имени С. Айни, кафедра Экспериментальная физика	S. Aini Tajik State Pedagogical University, Department of Experimental Physics
E-mail: mp.kulob@mail.ru		
ORCID: https://orcid.org/0009-0007-7641-5922		