

Тематическое направление: Взаимосвязь "структура-свойство". Часть II.

ТОПОЛОГИЧЕСКИЙ ПОДХОД К ОПИСАНИЮ СОЛЬВАТАЦИИ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ, СОДЕРЖАЩИХ ГЕТЕРОАТОМЫ.

© Урядов Владимир Георгиевич,^{*†} Аристова Наталья Васильевна
и Офицеров Евгений Николаевич

Кафедра органической химии. Казанский государственный технологический университет.

Ул. К. Маркса, 68. г. Казань 420015. Россия. Тел.: (8432) 721-253. E-mail: uryadov@kstu.ru

^{*}Ведущий направление; [†]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: топологический индекс Винера, энтальпия сольватации, корреляционные уравнения.

Резюме

Установлена взаимосвязь энтальпии сольватации неэлектролитов в органических растворителях с разностью значений топологического индекса Винера молекул растворенного вещества и растворителя, а также произведением молекулярной массы рассматриваемых органических соединений на соответствующее значение топологического индекса в степени 2/3.