

Полная исследовательская публикация _____ Тематический раздел: Исследование зависимостей «структура-свойство».

Регистрационный код публикации: 7-12-5-24

Подраздел: Физическая органическая химия.

Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции «Бутлеровские чтения». <http://butlerov.com/readings/>
УДК 544.169. Поступила в редакцию 28 декабря 2007 г.

Оценка связи структура – запах

© Белик Александр Васильевич*⁺ и Головатова Анна Юрьевна

Кафедра органической и неорганической химии. Челябинский государственный университет.
г. Челябинск, 454021. Ул. Бр. Кашириных, 129. Тел.: (351) 799-70-66. E-mail: belik@csu.ru

*Ведущий направление; ⁺ Поддерживающий переписку

Ключевые слова: модель «DENSON», структурно-чувствительный «частотный дескриптор», связь «структура-запах».

Аннотация

В работе представлен новый взгляд на проблему связи структура-запах в рамках «волновой» теории в ее предельном упрощении. Показана возможность с помощью одной расчетной величины для каждой молекулы органического вещества, названной «частотным дескриптором ν_{cp} », осуществить оценку его принадлежности к определенному типу запаха.