

Тематический раздел: Исследование зависимостей “структура – свойство”.

Краткое сообщение

Подраздел: Физическая органическая химия.

Регистрационный код публикации: 9-17-5-71

Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции “Бутлеровские чтения”. <http://butlerov.com/readings/>

Поступила в редакцию 25 ноября 2009 г. УДК 541.013.5:541.253:532.14.

Однопараметровая модель прогноза плотности органических веществ

© **Белик Александр Васильевич**

Кафедра органической химии. Челябинский государственный университет.

Ул. Бр. Кашириных, 129. г. Челябинск, 454001. Россия. Тел.: (351) 799-70-66. E-mail: belik@csu.ru

Ключевые слова: модель «DENSON», прогноз плотности органических веществ.

Аннотация

Рассмотрена возможность прогноза плотности ряда органических веществ с помощью имитационной функции (-6-12) при использовании одного атомного параметра. Согласие экспериментальных и расчетных данных удовлетворительное.