

Полная исследовательская публикация Тематический раздел: Теоретическая и компьютерная химия.
Регистрационный код публикации: 10-19-2-54 Подраздел: Физическая органическая химия.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции “Бутлеровские чтения”. <http://butlerov.com/readings/>
УДК 547.68+541.124/128. Поступила в редакцию 15 мая 2010 г.

Тематическое направление: Влияние среды на реакционную способность. Часть 17.

Зависимости основности органических соединений в газовой и водной фазе от молекулярных свойств

© Урядов Владимир Георгиевич,⁺ Аристова Наталья Васильевна
и Офицеров Евгений Николаевич*

*Кафедра органической химии. Казанский государственный технологический университет.
Ул. К. Маркса, 68. г. Казань, 420015. Республика Татарстан. Россия.
Тел.: (843) 272-12-53. E-mail: uryadov@kstu.ru*

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *основность топологический индекс, потенциал ионизации.*

Аннотация

Для ряда алифатических, ароматических и гетероциклических аминов, а также спиртов, карбонильных соединений, карбоновых кислот и сложных эфиров получены зависимости основности в газовой фазе от потенциала ионизации, топологического индекса и молярной массы. Кроме того, для рассмотренных аминов получены линейные зависимости pK_a сопряженной кислоты от нецелочисленной степени произведения молярной массы на значение топологического индекса в степени 2/3. Высказано предположение о взаимосвязи основности с формой движения молекул.