

Полная исследовательская публикация Тематический раздел: Теоретическая и компьютерная химия.
Регистрационный код публикации: 10-20-4-26 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 25 мая 2010 г.

Тематическое направление: Численная характеристика структуры органической молекулы.
Часть 11.

Описание поляризуемости молекул с использованием момента инерции вращательного движения и его характеристики

© Урядов Владимир Георгиевич,¹⁺ Аристова Наталья Васильевна,²
Соколов Юрий Александрович,¹ Шамсутдинов Альберт Фаридович³
и Офицеров Евгений Николаевич^{4*}

¹ Кафедра органической химии. Казанский государственный технологический университет.
Ул. К. Маркса, 68. г. Казань, 420015. Россия. Тел.: (8432) 638-795. E-mail: uryadov@kstu.ru

² Кафедра химии. Казанский государственный энергетический университет.

Ул. Красносельская, 51. г. Казань, 420066. Россия. Тел.: (8435) 194-224. E-mail: aristova@kstu.ru

³ ЦНИТ. Казанский государственный технологический университет.

Ул. К. Маркса, 68. г. Казань, 420015. Россия.

⁴ Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева. Миусская пл., 9. г. Москва, 125047. Россия. Тел.: (495) 978-87-33. E-mail: ofitser@mail.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: топологический индекс, тензор поляризуемости, момент инерции вращательного движения.

Аннотация

Получены зависимости значений осей эллипсоида поляризуемости молекул ряда органических и элементоорганических соединений от моментов инерции вращательного движения молекул и произведения молекулярной массы на значение топологического индекса Винера молекул в степени 2/3. Рассмотрена взаимосвязь моментов инерции вращательного движения молекул и произведения молекулярной массы на значение топологического индекса Винера молекул в степени 2/3.