

Попытка количественного описания взаимосвязи свойств соединения с его химическим строением по А.М. Бутлерову

© **Офицеров Евгений Николаевич**

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

Ключевые слова: теория химического строения органических соединений, А.М. Бутлеров, взаимосвязь физических и химических свойств со структурой, топология, геометрия молекул, электронное строение, момент инерции вращательного движения, дескрипторы структуры.

*К 150-летию создания
теории химического строения органических соединений*

Аннотация

В статье в историческом аспекте изложены некоторые ключевые положения А.М. Бутлерова теории химического строения органических соединений и их реализация в современном изложении. Основной упор сделан на бутлеровский постулат связи свойств соединений со строением. В соответствии с предложениями А.М. Бутлерова можно количественно химическую структуру органического соединения описывать независимыми дескрипторами трех типов: топологическим, в качестве которого может выступать один из топологических индексов, например, индекс Винера, геометрическим и электронным. В качестве геометрического дескриптора предложен момент инерции вращательного движения J или его характеристика $MW^{2/3}$. Дескриптор J не зависит от топологического. Его преимущество и независимость заключаются в том, что для него неважен порядок соединения атомов между собой. Его можно использовать для описания как классических молекул, так и для катенатов, димеров, ассоциатов, супрамолекулярных соединений, комплексов, которые выступают в качестве независимых кинетических образований при проявлении как реакционной способности, так и свойств. В качестве электронного приняты потенциал ионизации и энергия сродства к электрону. В соответствии с этим основной постулат теории – зависимость свойств y_i от структуры, – можно записать $y_i = f(W, J \text{ или } J_W, PI, A_E)$. В статье приведены несколько примеров использования предложенной зависимости.