

Кислотность ароматических сульфокислот в газовой и водной фазах

© Крылов^{1*} Евгений Николаевич, Груздев² Матвей Сергеевич
и Вирзум³ Людмила Викторовна

¹ Кафедра физической и органической химии. Ивановский государственный университет. Ул. Ермака, д.39. г. Иваново, 153025. Россия. Тел.: (84932) 37-37-03. E-mail: enk2000S@yandex.ru

² Институт химии растворов РАН. Ул. Академическая, д.1. г. Иваново, 153045.

³ Кафедра химии. Ивановская государственная сельскохозяйственная академия имени академика Д.К. Беляева. Ул. Советская, д.45. г. Иваново, 153012. Россия. E-mail: virzum@ivgsxa.ru

*Ведущий направление; †Поддерживающий переписку

Ключевые слова: ароматические сульфокислоты, депротонирование, рКа, локальная электрофильность, электростатический потенциал, квантово-химические дескрипторы.

Аннотация

Кислотные свойства ароматических сульфокислот описаны в рамках количественной теории ЖМКО Пирсона на основе концептуальной DFT. Обнаружено, что величины их рКа линейно коррелированы на локальную электроёмкость реакционного центра (атома кислорода) и его электростатический потенциал, как в газовой фазе, так и в водной среде. Указанная зависимость согласуются с физическим смыслом электрофильности как электроёмкости реакционного центра.