

分子诱导效应指数与脂肪族醛酮的沸点

张秀丽,汪勇先,李俊玲,林英武

中国科学院上海原子核研究所.上海(201800)

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 利用分子诱导效应指数,建立了三参数方法计算脂肪族醛酮沸点的关系式:  $\ln(820.5 - T_b) = 6.38327 - 1.23961 \times 10^{-1} N_c + 1.95353 \Delta I + 6.68434 \times 10^{-2} N$ ,

式中 $N_c$ 为脂肪族醛酮中烷基部分的有效碳链长度;  $\Delta I$ 为具有相同碳原子数目的支链烷基与直链烷基的诱导效应指数的差值,它表示羟基对醛酮沸点的影响;  $N$ 为碳原子数.

关键词 [分子](#) [诱导效应](#) [指数](#) [沸点](#) [脂肪族醛](#) [脂肪族酮](#) [活性](#)

分类号 [0621](#)

## Molecular inductive effect index and boiling point of aliphatic aldehydes and alkanones

Zhang Xiuli, Wang Yongxian, Li Junling, Lin Yingwu

Shanghai Institute of Nuclear Research, Chinese Academy of Sciences, Shanghai(201800)

**Abstract** Based on the molecular inductive effect index, a formula consisting of three parameters was proposed to calculate the boiling point of aliphatic aldehydes and alkanones.  $\ln(820.5 - T_b) = 6.38327 - 1.23961 \times 10^{-1} N_c + 1.95353 \Delta I + 6.68434 \times 10^{-2} N$ , where the  $N_c$  is the effective length of carbon chain of alkyl group in the aliphatic aldehydes and alkanones. The  $\Delta I$  is the inductive effect index difference between the corresponding branched and normal alkyl isomer containing the same carbon atom number, which expresses the effect of carbonyl group on the boiling point of aliphatic aldehydes and alkanones.  $N$  is the numbers of carbon atoms of aliphatic aldehydes and alkanones.

**Key words** [MOLECULAR INDUCTIVE EFFECT](#) [EXPONENT](#) [BOILING POINTS](#) [ALIPHATIC ALDEHYDES](#) [ALIPHATIC KETONES](#) [ACTIVITY](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(0KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [参考文献](#)

服务与反馈

▶ [把本文推荐给朋友](#)

▶ [加入我的书架](#)

▶ [加入引用管理器](#)

▶ [复制索引](#)

▶ [Email Alert](#)

▶ [文章反馈](#)

▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

▶ [本刊中包含“分子”的相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

- [张秀丽](#)
- [汪勇先](#)
- [李俊玲](#)
- [林英武](#)