

АКАДЕМИЯ НАУК СССР

Институт физиологически активных веществ

№ 1001-388.

УДК 536.7 + 541.571.9 + 547.56

О.А. Раевский, В.П. Соловьев, В.Ю. Григорьев

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ВОДОРОДНОЙ СВЯЗИ
ФЕНОЛОВ С ОРГАНИЧЕСКИМИ ОСНОВАНИЯМИ

// Ден. ВИНИТИ. М., 1988. № 1001-388. 83 с. //

РХХип. 1988. 71Б3041 зеп.

ЧЕРНОГОЛОВКА-1988

Введение

Проблема "водородной связи" известна более полувека. Детальное рассмотрение как истории этой проблемы, так и ее теоретических аспектов проведено во многих монографиях, в частности в [1,2]. К настоящему времени сформировалось представление о том, что многие свойства жидких и твердофазных систем определяются межмолекулярными взаимодействиями, существенный вклад в которые вносит водородная связь. Отсюда яствует чрезвычайно важная роль количественных характеристик водородной связи получаемых на основе теоретических подходов и экспериментальных результатов.

Важнейшими количественными характеристиками Н-связей можно считать термодинамические величины, такие как энталпия ΔH и энтропия ΔS . В случае равновесных систем сюда следует отнести также константу равновесия K . В последнее десятилетие в литературе опубликовано около тысячи работ, прямо или косвенно связанных с количественной оценкой указанных термодинамических характеристик. Вероятно, это является следствием возрастающего интереса к количественным данным по межмолекулярным взаимодействиям в жидкостях, полимерах, белках и других биологических объектах. Способствовало этому развитие технологии научного приборостроения (прецзионные и высокопроизводительные спектральные и калориметрические приборы) и потребностей техники, в частности в получении высокочистых веществ [3]. В связи с этим, а также ввиду возросшего уровня математического обеспечения обработки экспериментальных данных, повысились точность и достоверность публикуемых термодинамических величин по водородной связи.

Наибольший массив данных, включающих энталпию и энтропию водородной связи, посвящен изучению термодинамических характеристик водородной связи фенолов с разнообразными органическими осно-

ваниями в различных средах. Причиной этого следует считать следующие обстоятельства. Прежде всего, фенолы являются достаточно сильными протонодонорными соединениями, обуславливающими относительно высокие для Н-связей значения ΔH и K , которые могут быть измерены с хорошей точностью. Наличие в ИК-спектрах признаков водородной связи способствует широкому привлечению к оценке термодинамических характеристик спектрофотометрических методик [4]. Наконец, внимание к фенолам связано с их конкретной биологической активностью (см., например, [5]) и использованием при моделировании переноса протонов вдоль тирозиновых цепей в бактериородопсине [6,7].

В настоящем обзоре поставлена задача систематизации и анализа обширного материала по термодинамическим характеристикам Н-связывания различных фенолов с органическими основаниями, опубликованного за последнее десятилетие. Работа основывалась на данных, приведенных в работах [8-73], охватывающих Н-комплексы 52 фенолов, содержащих в самом различном сочетании заместители в орто-, мета-, пара-положениях по отношению к гидроксильной группе. Рассмотрены данные, помещенные в табл. I по > 800 комплексам фенолов с основаниями, содержащими электронодонорные атомы кислорода, азота, серы, фосфора и селена. Существенна и вариация величин термодинамических характеристик. Так, минимальные значения $-\Delta H$, $-\Delta S$ и $\lg K$ равны, соответственно, 2,8 кДж/моль, 10,9 Дж/(моль · К) и -0,95 (К в л/моль). Максимальные значения этих характеристик в изученном массиве данных составляют, соответственно, 84,9 кДж/моль, 221 Дж/(моль · К) и 4,41.

Из данных табл. I следует, что для $\sim 75\%$ систем величины $\lg K$, ΔH и ΔS Н-связи получены методом ИК-спектроскопии. В случае образования в растворе одного Н-комплекса состава 1:1 (фенол:основание) для расчета константы равновесия широко используется уравнение:

$$K = \frac{1 - \frac{A}{A^o}}{\frac{A}{A^o} [C_B^o - C_A^o (1 - \frac{A}{A^o})]} \quad (I)$$

в котором A^o и A равны, соответственно, оптической плотности для полосы валентных колебаний ν_{OH} свободного фенола до и после комплексообразования, а C_A^o и C_B^o - начальные концентрации протонодонора (фенола) и акцептора (основания). Как правило, исследование выполняется при $C_B^o \gg C_A^o$ из-за необходимости использовать малые концентрации фенолов при которых отсутствует их самоассоциация и для подавления образования комплексов A_2B в растворе.

Для расчета ΔH° и ΔS° Н-связи константу равновесия K измеряют при нескольких значениях температур, обычно не ниже 300 К и не выше 350 К и, как правило, в диапазоне температур 30°. В этих условиях экспериментальные результаты надежно описываются уравнением прямой:

$$\lg K = a + \frac{b}{T} \quad (2)$$

Дифференцируя это уравнение по температуре и сравнивая с уравнением изобары химической реакции

$$\frac{d \ln K}{dT} = \frac{\Delta H^\circ}{RT^2} \quad (3)$$

можно убедиться, что $\Delta H^\circ = -bR\ln 10$. Таким образом, расчет энтальпии Н-связи по данным температурной зависимости логарифма константы равновесия предполагает использование уравнения (2), а экспериментальные результаты подтверждают его справедливость и тем самым доказывают, что энтальпия водородной связи практически не зависит от температуры в температурном интервале от 300 до 350 К.

Уравнение (2) позволяет непосредственно рассчитать энергию Гиббса водородной связи, используя известное соотношение $\Delta G^\circ = -RT\ln K$:

$$\Delta \theta^\circ = -R \ln 10 (aT + b) \quad (4)$$

Поскольку $-\Delta S^\circ = \left(\frac{\partial \Delta \theta}{\partial T}\right)_P$, из соотношения (4) следует, что энтропия водородной связи также не зависит от температуры ($\Delta S^\circ = R a \ln 10$) и если известны значения $\Delta H_{T_0}^\circ$ и $\Delta S_{T_0}^\circ$ при какой-либо температуре T_0 можно определить температурные зависимости энергий Гиббса и констант равновесия в температурном интервале, в котором справедливо соотношение (2):

$$\Delta \theta_T^\circ = \Delta H_{T_0}^\circ - T \Delta S_{T_0}^\circ \quad (5)$$

$$\ln K_T = - \frac{\Delta \theta_T^\circ}{RT} \quad (6)$$

Соотношения (5) и (6) использованы нами в расчетах $\Delta \theta_{298}^\circ$ и $\lg K_{298}$ для ряда систем, для которых имелись литературные данные по константам равновесия при иных, чем 298 К температурах. Это позволило существенно расширить массив анализируемых в данной работе данных по энталпиям, энтропиям и константам Н-связывания фенолов с самыми разнообразными основаниями.

Электроноакцепторные энталпийные факторы фенолов

Изучение такого сложного явления, как межмолекулярные взаимодействия, вызывает необходимость вывода простых формул, которые могли бы позволить проведение расчетов его физико-химических характеристик. Теоретической основой для вывода упрощенных формул, описывающих энергию взаимодействия молекул, служит представление о возмущении исходных систем. Как отмечено в [74], квантовомеханические неэмпирические (*ab initio*) расчеты настолько сложны, что вычисление энергии взаимодействия может осуществляться только с использованием данных об изолированных подсистемах.

Еще совсем недавно представление об относительной донорной или

акцепторной функциях носили только качественный характер (см., например, [75]). В середине шестидесятых годов возникают уже количественные эмпирические подходы к расчету термодинамических характеристик межмолекулярного взаимодействия (в первую очередь расчет энталпии комплексообразования). Здесь можно упомянуть серию работ Гутмана, в которых была создана шкала донорных чисел ΔN , определяемых как числовые значения энталпий реакций различных доноров со стандартным акцептором [76-80]. Однако при таком подходе необходимо иметь экспериментальные данные по ΔH всех возможных комплексов донорных молекул с одним и тем же акцептором и всех комплексов акцепторов с одним и тем же донором. Недостаточная растворимость отдельных комплексов и протекание в ряде случаев химических реакций препятствует широкому распространению такого подхода.

Гораздо перспективнее разработки систем эмпирических параметров с возможностью предсказания термодинамических характеристик комплексообразования любой пары донор-акцептор. В отношении энталпии здесь, прежде всего, необходимо указать на серию публикаций Драго с сотрудниками [81-85], в которой предложена аддитивно-мультипликативная схема расчета энталпии комплексообразования. Последняя модификация уравнения Драго выглядит следующим образом [86]:

$$-\Delta H = e_A e_B + C_A C_B + t_A t_B \quad (7)$$

где параметры e указывают на тенденцию льюисовской кислоты (A) или основания (B) подвергаться электростатическому взаимодействию, C - ковалентному и t - взаимодействию с переносом заряда. В указанной работе на основе экспериментальных значений ΔH 365 комплексов рассчитаны величины параметров e , C и t 33 льюисовских кислот и 47 оснований, что дает возможность оценить значения ΔH для еще 1186 комплексов этих кислот и оснований. Указанная схема дает неплохие

оценки величин ΔH и поэтому получила достаточное распространение. В качестве основного недостатка формулы Драго следует рассматривать невозможность сопоставления относительной электронодонорной и акцепторной способности атомов и групп вследствие того, что величина энталпии оценивается через несколько параметров.

В этом отношении полезными оказываются еще более простые формулы, основанные на предположении о постоянстве донорных и акцепторных функций взаимодействующих центров. Здесь, прежде всего, необходимо указать на работы Иогансена, в которых развито количественное представление о т.н. "правиле факторов". Правило факторов для энталпий и интенсивностей ИК спектров Н-комплексов было предложено первоначально в работе [87] и получило развитие в работах [88-91].

Правило факторов утверждает, что энталпия водородной связи пропорциональна произведению двух чисел — фактора i кислоты (P_i) и фактора j основания (E_j):

$$\Delta H_{ij} = \Delta H_{11} P_i E_j = -22,2 P_i E_j \quad (8)$$

где коэффициент пропорциональности ΔH_{11} — энталпия произвольного стандартного Н-комплекса, для партнеров которого положено $P_i = E_j = 1$. Иогансен выбрал в качестве стандартов фенол и диэтиловый эфир, для которых в среде CCl_4 при 298 К по данным указанного автора $-\Delta H = 22,2$ кДж/моль. В работах [92-94] в качестве стандартной реакции выбрано Н-связывание фенола с пиридином. Безразмерные P_i и E_j факторы характеризуют относительную энергетическую способность данной кислоты или основания к образованию Н-связей с любым основанием или кислотой. В формуле (8) факторы P_i и E_j взаимно независимы и постоянны. При таком подходе $M + N$ параметров равных суммарному числу кислот (M) и оснований (N) позволяют предсказать энергию $M \times N$ различных Н-комплексов.

Следует подчеркнуть, что вышеуказанный подход имеет важное значение для целенаправленного поиска химических соединений с полезными свойствами [95]. В обзоре, посвященном использованию количественных соотношений структура-активность, отмечена необходимость создания общей единой шкалы водородного связывания и констатируется, что исследования значительно продвинулись вперед в изучении этой проблемы [96].

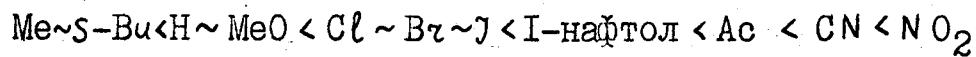
Развитию подхода Иогансена посвящены работы [97-101]. При $\Delta H_{ij} = 0$ необходимо в формуле (8) предполагать, что либо фактор P_i , либо E_j равен нулю. Диаметрально противоположный характер донорных и акцепторных функций позволил присвоить разные знаки их факторам (для электронодонорного знак плюс, для акцепторного-минус). Это дало возможность переписать формулу (8) в следующем виде:

$$\Delta H_{ij} = |\Delta H_{11}| E_i E_j \quad (9)$$

где $E_i = -P_i$. Такая запись выглядит вполне естественно с позиции физической химии, поскольку при H-связывании кислот и оснований произведение факторов с противоположными знаками приводит к экспериментально наблюдаемым отрицательным значениям ΔH .

Как уже указывалось, для фенола в работе [90] была принята величина фактора $P_i = 1,00$. В этой же статье на основании данных публикации [102] были оценены P-факторы пяти монозамещенных фенолов: 4-Мео-фенола ($P_i = 0,94$), 3-Ме-фенола ($P_i = 0,96$), 4-С ℓ -фенола ($P_i = 1,03$), 3-С ℓ -фенола ($P_i = 1,07$) и 4-Н О₂-фенола ($P_i = 1,20$). Собранный в настоящей работе массив данных по энталпиям H-связывания более 50 фенолов с различными основаниями в растворах СС ℓ_4 (стандартная среда при оценке P_i или E_i) дает возможность не только расширить материал по значениям факторов, но и использовать статистический подход при их оценке.

В табл.2 приведены значения энталпий комплексообразования 12 фенолов с наиболее распространенными основаниями. Качественное сопоставление этих данных показывает "работоспособность" идеи о постоянстве донорных и акцепторных функций кислот и оснований при образовании Н-комплексов. Так, со всеми 16 основаниями Н-связывание с 4-N₂O₂-фенолом приводит к максимальным значениям ΔH по сравнению с другими фенолами, представленными в табл.2. Минимальные значения ΔH приходятся на 4-Ме- и 4-S-Ви-фенолы. Для трех фенолов (4-Сl, 4-Br и 4-J) значения ΔH взаимодействий с одним и тем же основанием в пределах $\pm 0,7$ кДж/моль одинаковы. На качественном уровне относительную протонодонорную (кислотную) функцию указанных фенолов можно представить в виде следующего ряда:



Для количественной оценки значений электроноакцепторных факторов указанных фенолов были использованы данные табл.2 с составлением 128 нелинейных уравнений вида (9), где в качестве 27 неизвестных фигурировали величина ΔH_{11} , значения E_i одиннадцати замещенных фенолов и значения E_j пятнадцати оснований. В рамках единой шкалы Н-связывания значение E_i фенола было закреплено и приравнено -1,00. Задача была решена на ЭВМ Nord-I0 по программе Нэлдера и Мида [103]. Для остальных фенолов материал по ΔH не был столь однородным. Поэтому для них нахождение значений E_i производилось следующим образом. Из табл.1 для каждого фенола, не вошедшего в табл.2, отбирались данные по ΔH его взаимодействия с тем же основанием (и в тех же условиях), для которого были данные по взаимодействию с одним из фенолов в табл.2. В соответствии с уравнением (9) отношение энталпий взаимодействия таких двух систем равно отношению E -факторов фенолов и дает возможность при знании электроноакцепторного фактора одного

из замещенных фенолов определить значение E_i для другого. Полученные таким образом значения E_i для одного и того же замещенного фенола подвергались статистической обработке.

Результаты проделанной работы по определению значений E_i 52 фенолов суммированы в табл. 4. Безусловно, наиболее достоверными данными следует считать значения E_i одиннадцати замещенных фенолов из табл. 2. В остальных случаях точность оценки значений E_i в значительной мере определяется количеством систем, из которых произведено их определение. Представляется, что для 3-OH-, 2,3-Cl₂-⁻, 2,4-Cl₂-⁻, 2,4-(NO₂)₂-⁻, 2,4,6-t-Bu₃-⁻, 2,6-Ad₂-4-t-Bu-⁻, 2,3,4-Cl₃-фенолов и 2-нафтола величины E_i , полученные по данным ΔH менее чем для десяти систем, следует считать приближенными и подлежащими в дальнейшем уточнению. Для остальных сорока четырех замещенных фенолов достаточно большое число систем, использованных при расчетах, и разнообразие в них оснований дает возможность заключить, что получены достаточно надежные значения E_i , которые могут быть широко использованы для оценки энталпий Н-связывания этих фенолов с различными основаниями.

При рассмотрении как данных по E_i , так и полученного при расчетах указанных 128 нелинейных уравнений значения $\Delta H_{41} = 22,5$ кДж/моль обращает на себя внимание практическое их совпадение с аналогичными параметрами, найденными в [90]. Поскольку в настоящей работе использовался иной массив данных с широкой вариацией структуры оснований, соответствие результатов двух работ следует рассматривать в качестве весомого аргумента в пользу справедливости правила факторов. Что же касается величин E_i то, прежде всего, необходимо отметить большой интервал изменения E_i при вариации заместителей в бензольном кольце. Так 2,4-(NO₂)₂-⁻ и 3,4,5-Cl₃-⁻, 4-NO₂-фенолы можно рас-

сматривать в качестве сильных протонодонорных производных, сопоставимых по этому свойству с органическими кислотами [90,101]. Введение же в положения 2 и 6 объемных трет-бутильных и адамантильных заместителей приводит к резкому снижению протонодонорной способности соответствующих замещенных фенолов. В этих случаях электроакцепторные факторы оказались близкими к величинам E_i в спиртах жирного ряда [90,101]. Далее, для 3- и 4-монозамещенных фенола величины E_i вполне согласуются с представлениями теоретической органической химии о влиянии заместителей в бензольном кольце на различные свойства ароматических производных. Так алкильные заместители, повышающие электронодонорную способность кислорода гидроксильной группы, приводят к значениям E_i меньше единицы, отражая уменьшение электроакцепторной способности протона гидроксильной группы по сравнению с фенолом. Электроотрицательные заместители, напротив, повышают значения E_i , что является следствием возрастания электроакцепторной способности протона гидроксильной группы. Для четырех фенолов, в молекулах которых имеется несколько заместителей 3,4,5-положениях также наблюдается аналогичная картина. Более того, в рамках регрессионного анализа взаимосвязь между природой заместителей и величинами E_i носит количественный характер. Для 2I изученного в данной работе фенола, содержащего в 3,4,5-положениях различные заместители, наблюдается следующая зависимость E_i от суммы констант Гамметта σ [104,105]:

$$E_i = -0,99 - 0,28 \sum_k \sigma_k \quad (n=2I, R=0,958, SD=0,03) \quad (10)$$

где n - число точек, R - коэффициент множественной корреляции, SD - стандартное отклонение.

Введение заместителей в орто-положение по отношению к гидроксильной группе фенола в значительной мере осложняет наблюдаемую картину по

формированию в этих соединениях электроноакцепторных свойств. Включение в ряд монозамещенных фенолов не только соединений, имеющих по одному заместителю в мета- и пара-положениях, но и в орто-положении (использовались константы b_0 [104]) приводит к заметному понижению коэффициента корреляции:

$$E = -0,93 - 0,42 \sum_k b_k \quad (n=20, R=0,831, S^2=0,10) \quad (II)$$

Что же касается соединений, имеющих заместители одновременно в мета- и пара-положениях, то ситуация не поддается даже качественному анализу. Действительно, трудно объяснить, например, почему наблюдаемый логический ход увеличения E_i при переходе от 2,6-Cl₂-фенола к 2,3,6-Cl₃- , 2,4,6-Cl₃- , 2,3,4,5-Cl₄-фенолам завершается уменьшением E_i в 2,3,4,5,6-Cl₅-феноле? В этой группе соединений можно лишь отметить, что две алкильные группы в орто-положениях, очевидно, в значительной степени блокируют подход оснований к гидроксильной группе и тем самым приводят к понижению значений E_i .

Энтропийный фактор при комплексообразовании фенолов с органическими основаниями.

Следует подчеркнуть, что нельзя охарактеризовать термодинамику водородной связи только с помощью электронодонорных и акцепторных энталпийных факторов и, следовательно, энталпии. Немаловажная роль принадлежит энтропии. В [95] выделено четыре варианта сочетания ΔH и ΔS :

1. Изменение энталпии положительно, а изменение энтропии отрицательно. В этом случае при любых температурах и абсолютных значениях ΔH и ΔS комплексообразования практически не происходит

2. Изменения энталпии и энтропии положительны. В этой ситуации решающее влияние на реакцию комплексообразования окажет соотношение абсолютных значений ΔH и ΔS . При $|T\Delta S| > |\Delta H|$ будет происход-

дить заметное связывание.

3. Изменение энталпии и энтропии отрицательно. В этом случае заметное связывание будет происходить при $|\Delta H| > |T \Delta S|$

4. Изменение энталпии отрицательно, а изменение энтропии положительно. При такой ситуации отрицательное значение энергии Гиббса получается как за счет ΔH , так и ΔS .

Для донорно-акцепторных, и в частности Н-комплексов, типичным является третий случай [106]. При этом значительные изменения ΔH и ΔS подчас не влекут за собой существенных изменений энергии Гиббса. Связывают это явление со взаимной компенсацией ΔH и ΔS : считается, что чем прочнее молекулярная связь, тем больше степеней свободы теряет система.

Взаимосвязь энталпии и энтропии при Н-связывании фенолов

Исходя из вышеизложенного естественным является стремление установить количественную взаимосвязь между ΔH и ΔS рассматриваемых реакций Н-связывания фенолов с основаниями. Как отмечено в [90], корреляция между величинами ΔH и ΔS в узких классах веществ для Н-связей известна давно. В работе [107] предложено более общее уравнение $\Delta S = k \Delta H + C$ для донорно-акцепторного взаимодействия. Исходя из него в [90] предложено соотношение:

$$\Delta S_{ij} - C = (\Delta S_{11} - C) P_i E_j \quad (12)$$

Однако в [90] отмечается, что энтропийные факторы должны отличаться от энталпийных. В связи с этим заключением распространения правила факторов на энтропии в работе [90] произведено не было.

В работе [108] совершена удачная попытка установить линейную корреляцию между ΔH и ΔS в широком ряду разнообразных комплексов. В качестве электронодонорных партнеров в этих комплексах выступали сульфиды, тетрагидротиофен, селеноксан, пиридин и его замещенные,

диалкиловые эфиры, ацетонитрил, замещенные бензонитрила, этилацетат и т.д., а в качестве электроноакцепторных молекул-иод, trimetil- и трифтористый бор, хлорное олово, четыреххлористый титан, фенол, 3-Сℓ-фенол, 3-N O₂-фенол, 4-N O₂-фенол, 4-МеO-фенол, 3-Ме-фенол.

Уравнение выглядит следующим образом:

$$-\Delta H(\text{ккал/моль}) = -0,337 \Delta S (\text{кал/(моль}\cdot\text{К}) + 3,1 \quad (I3)$$
$$(n=80, R=0,991)$$

В указанной работе делается вывод о том, что линейная зависимость между ΔH и ΔS охватывает широкий круг разнообразных соединений и, вероятно, является общей закономерностью донорно-акцепторного взаимодействия, включая водородную связь.

Поскольку выведенное уравнение (I3) основывалось на использовании данных, включающих комплексы с участием пяти фенолов, в настоящей работе была предпринята попытка использования его для оценки значений ΔH из известных значений ΔS и наоборот. Результаты такого подхода оказались неудовлетворительными. Представляется, что это следствие того, что хотя "компенсационный" эффект между ΔH и ΔS действительно свойственен для донорно-акцепторного комплексообразования, степень этой компенсации определяется структурными особенностями конкретных партнеров по взаимодействию. Следовательно, у каждой группы комплексов может быть своя зависимость ΔH от ΔS . В случае же широкого интервала в величинах термодинамических параметров, как это имело место в работе [108], эти особенности отдельных групп соединений оказались замаскированными.

В связи с этим, в данной работе проведено сопоставление ΔH и ΔS как для всего массива данных, так и по отдельным группам комплексов. Уравнение взаимосвязи между ΔH и ΔS для всех собранных в настоящей работе комплексов фенолов с разнообразными основаниями

выглядит следующим образом: *)

$$\Delta H = -8,48 + 0,309 \Delta S \quad (n=804, R=0,785, SD=5,35) \quad (I4)$$

Низкий коэффициент корреляции, обеспечивающий только $\sim 60\%$ правильного предсказания, позволяет предполагать не столько очевидную взаимосвязь между ΔH и ΔS , сколько тенденцию к этому. Не улучшает ситуацию и отбор систем в одном и том же растворителе. Так, для всех Н-комплексов фенолов в СС ℓ_4 :

$$\Delta H = -10,91 + 0,264 \Delta S \quad (n=411, R=0,558, SD=5,50) \quad (I5)$$

Для оценки влияния заместителей в фенолах на взаимосвязь между ΔH и ΔS получены уравнения для отдельных групп фенолов.

В случае комплексов фенола в любых средах:

$$\Delta H = -11,52 + 0,239 \Delta S \quad (n=183, R=0,772, SD=4,56) \quad (I6)$$

и ситуация не улучшается при стандартизации среды. Для комплексов 4-С ℓ -фенола в любых растворителях:

$$\Delta H = -11,70 + 0,268 \Delta S \quad (n=57, R=0,854, SD=4,59) \quad (I7)$$

Для комплексов 4-Ме-фенола:

$$\Delta H = -7,12 + 0,343 \Delta S \quad (n=40, R=0,879, SD=3,79) \quad (I8)$$

Примерно такая же зависимость для комплексов 3-Вг-фенола:

$$\Delta H = -7,16 + 0,367 \Delta S \quad (n=10, R=0,810, SD=3,63) \quad (I9)$$

В случае 2-Ме-фенола наблюдается отличие от предыдущих случаев в свободном члене:

$$\Delta H = -3,58 + 0,382 \Delta S \quad (n=10, R=0,947, SD=2,38) \quad (20)$$

При переходе к 2-С ℓ -фенолу меняется коэффициент при ΔS :

$$\Delta H = -8,52 + 0,249 \Delta S \quad (n=8, R=0,979, SD=1,24) \quad (21)$$

В комплексах же 2-МеO-фенола в свободном члене поменялся даже знак и ухудшился коэффициент корреляции:

$$\Delta H = 0,26 + 0,373 \Delta S \quad (n=12, R=0,868, SD=1,55) \quad (22)$$

Следует отметить, что в собранном в данной работе массиве значе-

*) Здесь и далее ΔH в кДж/моль, ΔS в Дж/(моль·К).

ний ΔH и ΔS для комплексов различных фенолов в ряду каждого конкретного замещенного фенола имеется свой набор оснований. Это оказывает несомненное влияние на характер зависимости между ΔH и ΔS . Так, например, высокий коэффициент корреляции для 2-Cl-фенола, вероятно, связан с тем, что в качестве партнеров этого акцептора выступали только азотрганические основания. Для этого класса электронодонорных соединений неплохие зависимости ΔH от ΔS наблюдаются и для других замещенных фенола:

для фенола:

$$\Delta H = -11,03 + 0,263 \Delta S \quad (n=59, R=0,945, SD=2,54) \quad (23)$$

для 4-Cl-фенола:

$$\Delta H = -9,68 + 0,293 \Delta S \quad (n=30, R=0,914, SD=3,84) \quad (24)$$

для 4-Me-фенола:

$$\Delta H = -7,39 + 0,340 \Delta S \quad (n=17, R=0,982, SD=1,67) \quad (25)$$

для 4-F-фенола:

$$\Delta H = 6,94 + 0,497 \Delta S \quad (n=12, R=0,805, SD=3,98) \quad (26)$$

для 4-MeO-фенола:

$$\Delta H = -8,55 + 0,234 \Delta S \quad (n=11, R=0,697, SD=4,62) \quad (27)$$

В двух последних случаях резко ухудшилась корреляция и изменились коэффициенты уравнений. Причиной этого можно считать наличие в массивах данных по этим двум фенолам значений ΔH и ΔS для комплексов с нитрилами. Исключение из массива данных 4-MeO-фенола комплексов с нитрилами улучшает значение R :

$$\Delta H = -5,40 + 0,386 \Delta S \quad (n=7, R=0,869, SD=3,90) \quad (28)$$

Изложенное в этом разделе свидетельствует, что изменение энтропии H-связывания фенолов является следствием не только компенсационного эффекта, но и структурных особенностей партнеров по взаимодействию, поэтому путь расчета термодинамических параметров из корреляций

между ΔH и ΔS не в состоянии обеспечить надежными данными для расчета констант устойчивости комплексов.

Постоянство энтропийных факторов фенолов

Для оценки энтропии Н-связи в настоящей работе была проверена возможность применения в прямом виде правила факторов по отношению к энтропии. В таком подходе предполагается, что энтропия водородной связи пропорциональна произведению двух чисел: энтропийного фактора i кислоты (O_i) и энтропийного фактора j основания (O_j):

$$\Delta S_{ij} = |\Delta S_{11}| O_i O_j \quad (29)$$

где ΔS_{11} — коэффициент пропорциональности. Для количественной оценки значений O_i , O_j и ΔS_{11} были использованы данные по энтропии комплексов, включенных в табл. 3. Для фенола было принято значение $O_i = 1$. Оценка искомых параметров была проведена аналогично расчету энталпийных факторов. Результаты проделанной работы по определению значений O_i пятидесяти двух фенолов суммированы в табл. 4. Рассчитанное значение $\Delta S_{11} = -59,6$ Дж/(моль·К). Величины O_i меняются в пределах 0,66 \div 1,42. При сопоставлении значений O_i и E_i фенолов обнаруживается некоторая тенденция в симбатном изменении этих параметров, но определенной взаимосвязи не наблюдается, поэтому целесообразнее рассматривать энталпийные и энтропийные факторы отдельно.

Полученный набор энталпийных и энтропийных факторов фенолов позволяет рассчитывать термодинамические характеристики водородной связи новых систем. В настоящей работе произведен расчет термодинамических параметров для систем, не включенных в учебные выборки, на основе которых были оценены факторы E_i и O_i . Расчет производился следующим образом: энталпийный E_j и энтропийный O_j факторы основания, образующего Н-комплекс с одним из фенолов, определялись из данных по ΔH , ΔS Н-связывания основания с этим фенолом, используя

зая формулы (9) и (29) с привлечением из табл.4 величин E_i и O_i фенола. Затем рассчитанные значения E_j и O_j этого основания позволяли по тем же формулам оценить величины ΔH и ΔS с другими фенолами для которых известны факторы E_i и O_i .

Результаты таких оценок представлены в табл.5. В целом, согласие рассчитанных и экспериментальных величин ΔH , ΔS и $\lg K$ вполне удовлетворительное и может рассматриваться как свидетельство возможности использования энталпийных и энтропийных факторов, по крайней мере, для предварительной оценки термодинамических параметров Н-связывания рассмотренных в настоящей работе различных фенолов с разнообразными основаниями в растворах CCl_4 .

Влияние среды на термодинамические характеристики водородной связи фенолов с органическими основаниями

Как правило взаимодействие по типу Н-связывания изучается в инертных растворителях, исключающих специфическое взаимодействие реагирующих веществ с растворителем. Более половины приведенных в табл. I систем изучено в четыреххлористом углероде. Рассчитанные нами энталпийные E_i и энтропийные O_i факторы фенолов также справедливы для Н-связывания в CCl_4 . Четыреххлористый углерод, по-видимому, вследствие своей инертности, прозрачности в ИК области валентных колебаний ν_{OH} фенолов и достаточно высокой температуры кипения широко используется при изучении термодинамики Н-связи спектрофотометрическим методом. Остальные растворители по частоте использования значительно уступают четыреххлористому углероду (см.табл.I): в бензоле изучено $\sim 15\%$ систем, в дихлорэтане и циклогексане по 10% систем, частота использования гептана, тетрахлорэтилена, хлороформа, гексана и октана составляет 1-4%, изредка в качестве растворителей служат сероуглерод, диоксан, толуол, этилбензол, 1,2-дихлорбензол,

ацетонитрил, нитрометан и дихлорметан.

Изучению влияния растворителей на термодинамические величины Н-связи фенолов с органическими основаниями посвящен ряд работ:

[5, 23, 36, 30, 50, 54, 55, 57]. В этих работах представлены данные по взаимодействию бензилацетата, бензальдегида, пиридина, диметилсульфоксида, триэтиламина, трибутиламина, N,N-диметилацетамида и гексаметилфосфотриамида с некоторыми фенолами в 4÷6 растворителях. Из этих данных следует, что существует линейная связь между ΔH и ΔS для одной и той же пары фенол-основание в различных средах. Поэтому величины ΔH , ΔS и $\Delta \delta$ интересуемого Н-комплекса в произвольном растворителе могут быть оценены, если имеются данные по ΔH или ΔS в искомом растворителе и данные по ΔH и ΔS по крайней мере в двух других растворителях. Учесть влияние растворителя на ΔH или ΔS Н-связи пытаются с помощью различных физико-химических характеристик растворителя, таких как диэлектрическая проницаемость, мольная рефракция или мольный объем, используемые в последнее время для расчета энталпий сolvатации [109]. Поиск корреляционных связей между этими характеристиками растворителей и энталпиями Н-комплексов пока не дают удовлетворительных результатов. Так отмеченная авторами работы [5] корреляционная зависимость между энталпией Н-связи и диэлектрической проницаемостью растворителя для взаимодействия бензилацетата и бензальдегида с фенолом не прослеживается для данных других авторов.

Обнадеживающим подходом по оценке влияния среды, особенно для растворителей способных образовывать водородную связь с растворенными веществами, является схема, предложенная в работе [54]. Если имеется два растворителя S_1 и S_2 , один из которых S_2 может

образовывать Н-связь с протонодонором А, то располагая данными по энталпиям Н-связи А с S_2 и электронодонором В в инертном растворителе S_1 , можно определить энталпию Н-связи между А и В в растворителе S_2 .

Заключение

К настоящему времени накоплен обширный спектрофотометрический и калориметрический материал по термодинамическим характеристикам Н-связывания различных замещенных фенола с разнообразными основаниями в средах разной полярности, вполне достаточный для выявления закономерностей изменения величин энталпий и энтропий водородной связи от структурных особенностей взаимодействующих веществ. Собранные в настоящей работе данные по термодинамическим характеристикам в растворах CCl_4 поддаются количественной обработке в рамках правила энталпийных и энтропийных факторов, основывающегося на предположении о постоянстве вкладов в энталпию и энтропию партнеров по Н-связыванию. Тем самым создается возможность оценки констант Н-связывания фенолов (и, как можно предполагать, и других электроноакцепторных соединений) с различными основаниями. Подобная оценка может оказаться весьма полезной как при планировании эксперимента, связанного с точным определением термодинамических характеристик новых систем, так и для количественного суждения об относительной способности к Н-связыванию различных электроно-донорных и акцепторных групп, входящих в состав сложных органических веществ, в частности, биологически активных соединений.

Литература

- I.The hydrogen bond/Ed.Schuster P.,Zundel G.,Sandorfy C.-Amsterdam: North-Holland,1976,vol.1-3,1549 p.
- 2.Межмолекулярные взаимодействия от двухатомных молекул до биополимеров /Под ред.Пюльмана Б.-М.:Мир,1981,592 с.
- 3.Девятых Г.Г.,Сенников П.Г.,Яньков С.В.-Успехи химии,1986,т.55,№8, с.I233-I257
- 4.Иогансен А.В.-В кн.:Водородная связь/Под ред.Соколова Н.Д.-М.:Наука, 1981,с.II2
- 5.Yasuda Y.,Tochicubo C.,Hashisuka Y.,Tomida H.,Ikeda K.-J.Med.Chem., 1982,vol.25,N3,p.315
- 6.Merz H.,Zundel G.-Biochem.Biophys.Res.Commun.,1981,vol.101, p.540
- 7.Hadzi D.-In:Spectroscopy of biological molecules/Ed.Sandorfy C., Theophanides T.-Reidel Publ.Company,1984,p.61
- 8.Davis K.M.C.,Deuchar J.A.,Ibbitson D.A.-J.Chem.Soc.Perkin Trans., 1975,Part 2,N7,p.793-795
- 9.Seidel H.,Ritter C.,Fruwert J.,Geiseler G.-Spectrochim.acta,1976, vol.32 A,N4,p.705-708
- 10.Goralski P.,Krzemien U.,Taniewska-Osinska S.-J.Chem.Soc. Faraday Trans.,1985,Part 1,vol.81,N3,p.695-701
- II.Боковкин И.М.,Семенов Б.К.-ХОХ,1975,т.45,№2,с.424-427
- I2.Misra R.,Singh A.,Shukla J.P.,Saxena M.C.-Phys.Chem.Liq.,1985, vol.15,N1,p.49-58
- I3.Ельцов А.В.,Квитко И.Я.,Панфилова Е.А.,Амеличев В.А.-ХОХ,1978,т.48, №10,с.2307-2312
- I4.Pikkarainen L.-Acta Univ Oul.,1980,vol.A98,chem.10,p.1-39
- I5.Билобров В.М.,Шурпач В.И.-Укр.хим.ж.,1982,т.48,№10,с.I037-I042

- I6. Киселев В.Д., Вейсман Е.А., Соломонов Б.Н., Коновалов А.И.-ЖХ, 1985,
т.55, №9, с.1965-1969
- I7. Jarva M.-Acta Univ.Oul., 1978, vol.A64, chem.5, p.1-37
- I8. Huyskens P.L., Cleuren W., Van Brabant-Govaerts H.M., Vnylstekе M.A.-
J.Phys.Chem., 1980, vol.84, N21, p.2740-2748
- I9. De Taeye J., Maes G., Zeegers-Huyskens T.-Bull.Soc.Chim.Belg., 1983,
vol.92, N11-12, p.917-922
20. Szemik A., Zeegers-Huyskens T.-J.Mol.Struct., 1984, vol.117, N3-4,
p.265-273
21. Jarva M., Saastamoinen M., Virtanen P.O.I.- Finn.Chem.Lett., 1974,
N5, p.169-172
22. Погорелый В.К., Кухтенко И.И., Толмачев А.И.-ТЭХ, 1975, т.II, №5, с.619-
624
23. Van Brabant-Govaerts H., Huyskens P.-Bull.Soc.Chim.Belg., 1981,
vol.90, N10, p.987-996
24. Kasende O., Zeegers-Huyskens T.-J.Phys.Chem., 1984, vol.88, N12,
p.2636-2641
25. De Taeye J., Zeegers-Huyskens T.-J.Pharm.Sci., 1985, vol.74, N6,
p.660-663
26. Ruostesuo P., Salminen U.-Spectrochim.acta, 1983, vol.39A, N7,
p.583-586
27. Ruostesuo P., Salminen U., Karjalainen J.-Finn.Chem.Lett., 1982,
N5, p.69-72
28. Ласкорин Б.Н., Якшин В.В., Шарапов Б.Н., Зарубин А.И.-ЖФХ, 1975, т.49,
№10, с.2685-2688
29. Kuopio R.-Acta Chem.Scand., 1977, vol.31A, N5, p.369-374
30. Spencer J.N., Harner R.S., Penturelli C.D.-J.Phys.Chem., 1975, vol.79,
N23, p.2488-2493

- 31.Ruostesuo P.-Finn.Chem.Lett., 1979, N7-8, p. 202-205
- 32.Машковский А.А., Набиуллин А.А., Одиноков С.Е.-Ж.прикл.спектроскопии, 1982, т.37, №4, с.623-628
- 33.Ruostesuo P.-Finn.Chem.Lett. - 1979, N7-8, p. 206-209
- 34.Pikkarainen L.-Ibid., 1980, N4, p. 109-112
- 35.Spencer J.N., Harner R.S., Freed L.I., Penturelli C.D.-J.Phys.Chem., 1975, vol.79, N4, p. 332-335
- 36.Jarva M.-Finn.Chem.Lett., 1978, N2-3, p. 67-70
- 37.Кештов М.Л., Васнеев В.А., Виноградова С.В., Коршак В.В.-Изв.АН СССР, Сер.хим., 1980, №12, с.2730-2734
- 38.Рыльцев Е.В., Шурубура А.К.-В кн.: Спектроскопия молекул и кристалло ч.2-Кiev:Наукова думка, 1980, с.152-164
- 39.Fonbert A.F., Huyskens P.L.-Can.j.Chem., 1976, vol.54, N4, p. 610-616
- 40.Vaes J., Zeegers-Huyskens T.-Tetrahedron, 1976, vol.32, N16, p. 2013-2016
- 41.Huyskens P.L., Cleuren W., Franz M., Vuylsteke M.A.-J.Phys.Chem., 1980, vol.84, N21, p. 2748-2751
- 42.Пилогин В.С., Васин С.В., Зиновьев В.В.-ЖХ, 1984, т.58, №4, с.937-941
- 43.Spencer J.N., Sweigart J.R., Brown M.E., Bensing R.L., Reisinger G.W.-J.Phys.Chem., 1976, vol.80, N8, p. 811-814
- 44.Mullens J., Yperman J., Francois J.P., Van Poucke L.C.-Ibid., 1985, vol.89, N13, p. 2937-2941
- 45.Beezer A.E., Hawksworth W.A., Orban M., Tyrrell H.J.V.-J.Chem.Soc. Faraday Trans., 1977, Part 1, vol.73, N9, p. 1326-1333
- 46.Sara V., Moravec J., Horak M.-Collect.Czech.Chem.Commun., 1979, vol.44, N1, p. 148-156
- 47.Rao C.V.R., Jacob C., Chandra A.K.-J.Chem.Soc.Faraday Trans., 1982, Part 1, vol.78, N10, p. 3025-3031

- 48.Пилогин В.С.,Васин С.В.,Маслова Т.А.-ЖХ,1981,т.51,№7,с.1460-1465
- 49.Семенова Р.Г.,Кириченко А.И.,Титов Е.В.,Рыбаченко В.И.-Деп.
ВИНТИ,№3484-79
- 50.Чипанина Н.Н.,Казакова Н.А.,Шестова Л.А.,Домнина Е.С.,Скворцова
Г.Г.,Фролов Ю.Л.-Ж.прикл.спектроскопии,1975,т.23,№1,с.97-100
- 51.Jawed I.-Bull.Chem.Soc.Jap.,1977,vol.50,N10,p.2602-2605
- 52.Farah L.,Giles G.,Wilson D.,Ohno A.,Scott R.M.-J.Phys.Chem.,
1979,vol.83,N19,p.2455-2458
- 53.Bullock A.T.,Howard C.B.-J.Chem.Soc.Faraday Trans.,1981,Part 1,
vol.77,N1,p.137-140
- 54.Ruostesuo P.-Finn.Chem.Lett.,1979,N7-8,p.202-205
- 55.Ruostesuo P.-Ibid.,p.206-209
- 56.Перепелкова Т.И.,Щербакова Э.С.,Гольдштейн И.П.,Гурьянова Е.Н.-
ЖХ,1975,т.45,№3,с.656-663
- 57.Libus W.,Mecik M.,Sulek W.-J.Solution Chem.,1977,vol.6,N12,
p.865-879
- 58.Nagendrappa S.R.R.,Jayadevappa E.S.-J.Karnatak.Univ.,Sci.,1975,
vol.20,p.16-22
- 59.Tewari K.C.,Galya L.G.,Egan K.M.,Li N.C.-Fuel,1978,vol.57,N4,
p.245-249
- 60.Ganguly T.,Banerjee S.B.-Spectrochim acta,1978,vol.34A,N6,
p.617-623
- 61.Gramstad T.,Simonsen O.R.-Ibid.,1976,vol.32A,N4,
p.723-730
- 62.Futsaeter N.,Gramstad T.-Ibid.,1980,vol.36A,N12,
p.1083-1088
- 63.Hirai K.,Aihara A.-Repts.Univ.Electro-Communs.,1976,vol.26,N2,
p.227-234

64. Murthy A.S.N., Ram R.A. - Spectrochim. acta, 1981, vol. 37A, N9,
p. 805-810
65. Сапачева Т.И., Джавадян Э.А., Александров А.Л. - ЖФХ, 1975, т. 49, №2,
с. 331-332
66. Ruostesuo P., Karjalainen J. - Finn. Chem. Lett., 1979, N7-8,
p. 210-213
67. Wawer I., Keck Z. - Ber. Bunsenges. Phys. Chem., 1976, b. 80, N6,
s. 522-525
68. Pang Teck S., Ng Soon-J. Magn. Reson., 1975, vol. 17, N2,
p. 166-173
69. Скрунц Л.К., Геллер Б.А. - ТЭХ, 1975, т. II, №3, с. 402-406
70. Ueji S. - J. Org. Chem., 1985, vol. 50, N15, p. 2711-2714
71. Austerheim A., Gramstad T. - Acta Chem. Scand., 1985, vol. 39B, N7,
p. 583-587
72. Wolff H., Zeller W. - J. Phys. Chem., 1982, vol. 86, N26,
p. 5243-5247
73. Вдовенко С.И., Земляной В.Н., Кухарь В.П. - ЖХХ, 1985, т. 55, №10, с. 2210-
2213
74. Клаверье П.-В кн.: Межмолекулярные взаимодействия от двухатомных
молекул до биополимеров/Под ред. Пюльмана Б.-М.: Мир, 1981, с. 99
75. Lindquist I. - Acta Chem. Scand., 1960, vol. 14 , N2, p. 453
76. Gutmann V., Steininger A., Wychera E. - Monatsh. Chem., 1966, vol. 97,
N2, p. 460
77. Gutmann V., Wychera E., Mairinger F. - Ibid., N14, p. 1265
78. Gutmann V. - Coord. Chem. Revs., 1967, vol. 2, N2, p. 239
79. Гутман В. Химия координационных соединений в неводных растворах.-
М.: Мир, 1971, с. 29
80. Gutmann V. - Coord. Chem. Revs., 1976, vol. 18, N2, p. 225

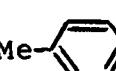
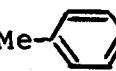
- 81.Drago R.S.,Wayland B.B.-J.Am.Chem.Soc.,1965,vol.87,N16,
p.3571
- 82.Drago R.S.,Vogel G.C.,Needham T.E.-Ibid.,1971,vol.93,N23,
p.6014
- 83.Guidry R.M.,Drago R.S.-Ibid.,1973,vol.95,N3,p.759
- 84.Mc Millan D.R.,Drago R.S.-Inorg.Chem.,1972,vol.11,N4,
p.872
- 85.Drago R.S.,Parr L.B.-J.Am.Chem.Soc.,1977,vol.99,N10,
p.3203
- 86.Kroeger M.K.,Drago R.S.-Ibid.,1981,vol.103,N12,p.3250
- 87.Иогансен А.В.-ДАН СССР,1965,т.164,№3,с.610-613
- 88.Иогансен А.В.,Куркчи Г.А.,Левина О.В.-ХФХ,1969,т.43,№II,с.29I5-
2929
- 89.Иогансен А.В.-Автореф.дис....д-ра хим.наук,М.,1969
- 90.Иогансен А.В.-ТЭХ,1971,т.7,№3,с.302-3II
- 91.Иогансен А.В.-Там же,с.3I2-3I7
- 92.Терентьев В.А.-ХФХ,1972,т.46,№8,с.19I8
- 93.Терентьев В.А.-Там же,1974,т.48,№2,с.46I
- 94.Терентьев В.А. Термодинамика донорно-акцепторной связи.-Саратов:
Саратовский университет,1981,с.36
- 95.Раевский О.А.-ТЭХ,1986,т.22,№4,с.450
- 96.Ганч К.-Хим.-фармац.ж.,1980,т.14,№10,с.15
- 97.Раевский О.А.,Новиков В.П.-Там же,1982,т.16,№5,с.583
- 98.Раевский О.А.,Авидон В.В.,Новиков В.П.-Там же,№8,с.968
- 99.Раевский О.А.,Григорьев В.Ю.,Соловьев В.П.-Там же,1984,т.18,№5,
с.578
- 100.Раевский О.А. Введение в конструирование биологически активных
веществ.-М.:МХТИ,1984,80 с.

- I01. Раевский О.А., Григорьев В.Ю. Задачи по курсу "Конструирование логически активных веществ". -М.: МХТИ, 1986, 80 с.
- I02. Shersetti S., Lusa A. - Spectrochim. acta, 1965, vol. 21A,
p. 1169
- I03. Химмельблау Д.М. Прикладное нелинейное программирование. -М.:
1975, с. 448-468
- I04. Справочник химика. Т. 3. -М.-Л.: Химия, 1965, с. 954-963
- I05. Hansch C., Leo A. Substituent constants for correlation analysis
in chemistry and biology. -N.-Y.: Wiley&Sohns, 1979, 340 p.
- I06. Гурьянова Е.Н., Гольдштейн И.П., Ромм И.П. Донорно-акцепторные
М.: Химия, 1973, 397 с.
- I07. Lopes M.C.S., Thompson H.W. - Spectrochim. acta, 1968, vol. 24A,
p. 1367
- I08. Гольдштейн И.П., Гурьянова Е.Н., Щербакова Э.С. - ЖХХ, 1970, т. 40
- I09. Соломонов Б.Н., Коновалов А.И., Новиков В.Б., Горбачук В.В., Не
С.А. - ЖХХ, 1985, т. 55, № 9, с. 1889-1906
- I10. Kamlet M.J., Gal J.-F., Maria P.-C., Taft R.W. - J. Chem. Soc. Perk
Trans., 1985, Part 2, N10, p. 1583-1589

Институт физиологически активных
веществ АН СССР

Таблица 1

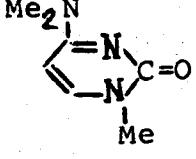
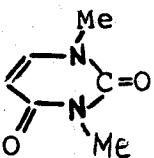
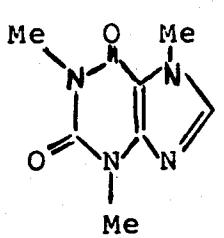
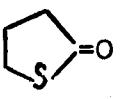
Термодинамические характеристики водородной связи
фенолов с органическими основаниями

Формула основания	Среда	T, K	lgK	-ΔH	-ΔS	Метод	ссылка
C_6H_5OH							
MeOH	CCl ₄	298	1.050	21.5	52.0	УФ, ИК	[8]
EtOH	CCl ₄	298	0.980	22.2	55.7	УФ, ИК	[8]
i-PrOH	CCl ₄	298	0.875	22.5	58.7	УФ, ИК	[8]
BuOH	CCl ₄	298	0.934	22.4	57.2	УФ, ИК	[8]
t-BuOH	CCl ₄	298	1.009	23.3	58.4	УФ, ИК	[8]
i-AmOH	CCl ₄	298	0.832	22.5	60.0	УФ, ИК	[8]
PhOH	CCl ₄	303	0.170	23.8	75.2	ИК	[9]
	CCl ₄	298	0.242	23.8	75.2	**	
EtOEt	CCl ₄	298	0.785	24.5	67.1	УФ, ИК	[8]
(i-Pr) ₂ O	CCl ₄	298	0.914	24.8	67.4	УФ, ИК	[8]
BuOBu	C ₆ H ₁₂	298	0.949	25.5	67.4	К	[18]
	CCl ₄	298	0.716	25.3	69.4	УФ, ИК	[8]
MeOCH ₂ CH ₂ OMe	CCl ₄	298	1.146	23.0	55.3	УФ, ИК	[8]
	CCl ₄	298	1.127	25.0	62.4	УФ, ИК	[8]
	CCl ₄	298	1.140	22.2	52.7	К	[10]
	CCl ₄	298	0.929	22.8	58.7	УФ, ИК	[8]
PhOMe	CCl ₄	303	0.130	12.1	37.5	ИК	[9]
	CCl ₄	298	0.162	12.1	37.5	**	
Me-  -OMe	CCl ₄	303	0.170	12.6	38.1	ИК	[9]
	CCl ₄	298	0.217	12.6	38.1	**	

<chem>Fc1ccccc1OC</chem>	<chem>CCl4</chem>	303	-0.201	12.1	43.9	ИК	[9]
<chem>Clc1ccccc1OC</chem>	<chem>CCl4</chem>	298	-0.173	12.1	43.9	**	
<chem>MeOc1ccccc1OC</chem>	<chem>CCl4</chem>	303	0.004	9.6	31.7	ИК	[9]
	<chem>CCl4</chem>	298	0.027	9.6	31.7	**	
<chem>MeOc1ccccc1OC</chem>	<chem>CCl4</chem>	303	0.471	15.9	43.4	ИК	[9]
	<chem>CCl4</chem>	298	0.518	15.9	43.4	**	
<chem>O=Cc1ccccc1</chem>	<chem>CCl4</chem>	298	0.726	18.0	46.4	ИК	[11]
<chem>PhC(=O)H</chem>	<chem>C7H16</chem>	299	1.608	18.5	31.2	ДР	[12]
	<chem>C7H16</chem>	298	1.617	18.5	31.2	**	
	<chem>C6H12</chem>	299	1.469	17.6	30.8	ДР	[12]
	<chem>C6H12</chem>	298	1.478	17.6	30.8	**	
	<chem>C4H8O2</chem>	299	1.235	16.3	30.9	ДР	[12]
	<chem>C4H8O2</chem>	298	1.244	16.3	30.9	**	
	<chem>CCl4</chem>	299	1.228	16.1	30.2	ДР	[12]
	<chem>CCl4</chem>	298	1.237	16.1	30.2	**	
	<chem>C6H6</chem>	299	1.162	15.5	29.5	ДР	[12]
	<chem>C6H6</chem>	298	1.169	15.5	29.5	**	
	<chem>C7H8</chem>	299	1.089	14.8	29.8	ДР	[12]
	<chem>C8H8</chem>	298	1.038	14.8	29.8	**	
<chem>Phc1ccccc1C(Cl)=O</chem>	<chem>CHCl3</chem>	298	0.770	23.0	93.7	ИК	[13]
<chem>MeC(=O)Me</chem>	<chem>CCl4</chem>	298	1.150	18.8	41.1	ИК	[14]
	<chem>CCl4</chem>	298	1.114	17.2	36.4	ИК	[15]
	<chem>C6H6</chem>	298	0.612	18.2	49.3	К	[23]
<chem>MeC(=O)Ph</chem>	<chem>C6H6</chem>	298	0.643	14.9	37.7	К	[23]
<chem>PhC(=O)Ph</chem>	<chem>CCl4</chem>	298	0.890	18.4	44.8	ИК	[14]
<chem>PhCH2OC(=O)Me</chem>	<chem>C7H16</chem>	299	2.171	21.8	31.2	ДР	[12]

C_7H_{16}	298	2.181	21.8	31.2	**	
C_6H_{12}	299	2.046	20.1	28.0	AP	[12]
C_6H_{12}	298	2.056	20.1	28.0	**	
$C_4H_8O_2$	299	1.878	17.4	22.1	AP	[12]
$C_4H_8O_2$	298	1.888	17.4	22.1	**	
CCl_4	299	1.849	16.9	21.2	AP	[12]
CCl_4	298	1.858	16.9	21.2	**	
C_6H_6	299	1.813	16.3	19.9	AP	[12]
C_6H_6	298	1.821	16.3	19.9	**	
C_7H_8	299	1.725	15.1	17.4	AP	[12]
C_7H_8	298	1.732	15.1	17.4	**	
CCl_4	298	1.876	25.9	51.1	ИК	[17]
CCl_4	298	1.895	22.6	39.5	ИК	[17]
CCl_4	298	1.806	25.5	51.0	УФ	[17]
CCl_4	298	1.628	25.1	53.0	УФ, ИК	[8]
$MeC(O)NMe_2$	CCl_4	2.130	16.7	15.4	ИК	[14]
$MeC(O)NMe_2$	C_6H_{12}	2.447	35.7	72.9	К	[18]
	CCl_4	2.127	26.8	49.2	ИК	[14]
	CCl_4	2.029	28.6	57.1	К	[17]
	CCl_4	2.127	26.8	49.2	УФ	[17]
	CCl_4	2.121	27.2	50.6	ИК	[15]
	C_6H_6	1.810	27.3	57.0	К	[23]
$EtC(O)NMe_2$	CCl_4	2.029	26.8	51.0	УФ	[17]
$ClCH_2C(O)NMe_2$	CCl_4	1.580	19.7	35.8	УФ	[17]
$PhC(O)NMe_2$	CCl_4	1.930	22.6	38.9	ИК	[14]
$MeC(O)NPh_2$	CCl_4	1.700	21.6	39.8	ИК	[14]
$PhC(O)NPh_2$	CCl_4	1.500	16.4	26.4	ИК	[14]
$Me_2NC(O)NMe_2$	CCl_4	2.170	30.0	59.0	ИК	[17]
	C_6H_6	1.630	28.2	63.4	К	[23]

<chem>CC(C(=O)N(C)C)C(=O)N(C)C</chem>	<chem>C6H6</chem>	298	1.810	30.3	67.1	ИК	[23]
<chem>CC(C(=O)N(C)C)=C=C</chem>	<chem>C6H6</chem>	298	2.120	24.5	41.6	ИК	[23]
<chem>CC1=CC=CNC1-C(=O)N(C)C</chem>	<chem>CCl4</chem>	295	2.040	21.9	35.2	ИК	[19]
<chem>CC1=CC=CNC1-C(=O)N(C)C</chem>	<chem>CCl4</chem>	298	2.001	21.9	35.2	**	
<chem>CC1=CC=CNC1-C(=O)N(C)C</chem>	<chem>CCl4</chem>	298	2.197	25.9	44.8	ИК	[17]
<chem>CC1=CC=CNC1-C(=O)N(C)C</chem>	<chem>CCl4</chem>	298	2.179	24.9	41.8	УФ	[17]
<chem>CC1=CC=CNC1-C(=O)OC</chem>	<chem>CCl4</chem>	293	1.444	19.0	37.2	ИК	[20]
<chem>CC1=CC=CNC1-C(=O)OC</chem>	<chem>CCl4</chem>	298	1.388	19.0	37.2	**	
<chem>CC1=CC=CNC1-C(=O)OC</chem>	<chem>CCl4</chem>	298	2.238	25.9	44.0	ИК	[21]
<chem>CC1=CC=COC1=CC</chem>	<chem>CCl4</chem>	313	1.546	23.0	43.9	ЯМР, ИК	[22]
<chem>CC1=CC=COC1=CC</chem>	<chem>CCl4</chem>	298	1.739	23.0	43.9	**	
<chem>CC1=CC=CNC1-C(=O)C(Cl)=N(C)C</chem>	<chem>CHCl3</chem>	298	0.866	38.5	148	ИК	[13]
<chem>CC1=CC=CNC1-C(=O)C(Cl)=N(C)C</chem>	<chem>CHCl3</chem>	298	1.050	27.6	115	ИК	[13]
<chem>CC1=CC=CNC1-C(=O)C(=O)N(C)C</chem>	<chem>CCl4</chem>	298	1.281	17.0	32.5	ИК	[17]
<chem>CC1=CC=CNC1-C(=O)C(=O)N(C)C</chem>	<chem>C2H4Cl2</chem>	298	1.193	23.6	56.3	ИК	[24]
<chem>CC1=CC=CNC1-C(=O)C(=O)N(C)C</chem>	<chem>C2H4Cl2</chem>	298	1.292	25.2	59.7	ИК	[24]

	$\text{C}_2\text{H}_4\text{Cl}_2$	298	2.048	31.4	66.1	ИК	[24]
	CCl_4	298	1.690	23.9	47.8	ИК	[24]
	$\text{C}_2\text{H}_4\text{Cl}_2$	298	1.034	22.0	54.0	ИК	[24]
	$\text{C}_2\text{H}_4\text{Cl}_2$	298	0.987	16.4	36.1	ИК	[25]
	CCl_4	298	0.833	16.4	39.1	ИК	[17]
$(i-\text{Pr})_2\text{P}(\text{O})\text{CH}_2\text{Cl}$	C_6H_{14}	298	3.270	38.6	67.1	*	
$\text{Me}(\text{EtO})\text{P}(\text{O})\text{ONC}(\text{Me})\text{Cl}$	C_6H_{14}	298	2.670	27.6	41.6	*	
$\text{Me}(\text{EtO})\text{P}(\text{O})\text{N}(\text{C}(=\text{O})\text{CH}_2\text{Cl})\text{Cl}$	C_6H_{14}	298	2.590	28.5	46.0	*	
Ph_3PO	CCl_4	298	2.819	30.4	48.0	ИК	[26]
$(\text{MeO})_3\text{PO}$	CCl_4	298	2.196	24.9	41.5	ИК	[27]
$(\text{PhO})_3\text{PO}$	CCl_4	298	1.618	21.3	40.5	ИК	[27]
$(\text{BuO})_2\text{P}(\text{O})\text{NHBu}$	CCl_4	298	2.798	27.6	39.0	ИК, К	[28]
$\text{BuOP}(\text{O})(\text{NHBu})_2$	CCl_4	298	3.250	33.1	48.8	ИК, К	[28]
$(\text{BuNH})_3\text{PO}$	CCl_4	298	3.919	36.8	48.4	ИК, К	[28]
$(\text{Me}_2\text{N})_3\text{PO}$	CCl_4	298	3.260	29.9	37.7	ИК	[29]
	CCl_4	298	3.256	33.7	50.7	ИК	[17]
Me_2SO	C_6H_{12}	293	2.909	37.5	72.3	ИК	[30]
	C_6H_{12}	298	2.793	37.5	72.3	**	
	CCl_4	293	2.332	26.5	45.8	ИК	[30]

<chem>CCl4</chem>	298	2.250	26.5	45.8	**	
<chem>CCl4</chem>	298	2.342	24.3	36.6	ИК	[31]
<chem>CS2</chem>	293	2.581	29.6	51.6	ИК	[30]
<chem>CS2</chem>	298	2.490	29.6	51.6	**	
<chem>C6H6</chem>	293	2.025	21.5	34.6	ИК	[30]
<chem>C6H6</chem>	298	1.959	21.5	34.6	**	
<chem>C2H4Cl2</chem>	293	1.519	25.4	57.6	ИК	[30]
<chem>C2H4Cl2</chem>	298	1.441	25.4	57.6	**	
<chem>CHCl3</chem>	293	1.288	13.1	20.0	ИК	[30]
<chem>CHCl3</chem>	298	1.250	13.1	20.0	**	
<chem>(CD3)2SO</chem>	<chem>CCl4</chem>	2.418	27.2	44.9	ИК	[32]
<chem>Ph2SO</chem>	<chem>CCl4</chem>	1.788	20.3	33.9	ИК	[33]
<chem>Me2NS(O)Me</chem>	<chem>CCl4</chem>	2.173	23.3	36.6	ИК	[31]
<chem>Me2NS(O)Ph</chem>	<chem>CCl4</chem>	1.877	20.6	32.7	ИК	[33]
<chem>MeSO2Me</chem>	<chem>CCl4</chem>	1.130	17.7	37.8	ИК	[14]
<chem>MeNHSO2Me</chem>	<chem>CCl4</chem>	1.130	16.7	34.4	ИК	[34]
<chem>Me2NSO2Me</chem>	<chem>CCl4</chem>	1.137	16.9	34.9	ИК	[21]
<chem>MeSO2NPh2</chem>	<chem>CCl4</chem>	1.020	13.9	27.1	ИК	[14]
<chem>Me2NSO2NMe2</chem>	<chem>CCl4</chem>	1.150	17.5	36.8	ИК	[14]
<chem>PhSO2NMe2</chem>	<chem>CCl4</chem>	1.050	15.7	32.6	ИК	[14]
<chem>PhSO2NPh2</chem>	<chem>CCl4</chem>	0.930	13.2	26.5	ИК	[14]
<chem>S(=O)(=O)c1ccccc1</chem>	<chem>CCl4</chem>	1.233	20.5	45.2	ИК	[21]
<chem>c1ccccc1S</chem>	<chem>CCl4</chem>	0.204	12.6	38.9	ИК	[35]
	<chem>CCl4</chem>	0.176	12.6	38.9	**	
<chem>Me2NC(S)Me</chem>	<chem>CCl4</chem>	1.058	16.0	33.4	ИК	[17]
<chem>Me2NC(S)NMe2</chem>	<chem>CCl4</chem>	1.179	19.8	43.9	ИК	[17]
<chem>O=C1C=CC=C1</chem>	<chem>CCl4</chem>	2.370	20.1	18.8	ЯМР, ИК	[22]
<chem>O=C1C=CC=C1</chem>	<chem>CCl4</chem>	2.542	20.1	18.8	**	

<chem>O=C(O)c1cc(C(=N)Nc2ccccc2)nc(Cl)c1C</chem>	<chem>CHCl3</chem>	298	0.624	31.4	119	ИК	[13]
<chem>Cn1ccccc1C(=N)Nc2ccccc2</chem>	<chem>CHCl3</chem>	298	0.659	10.9	46.9	ИК	[13]
<chem>Cn1ccccc1S</chem>	<chem>CCl4</chem>	298	1.201	15.8	30.0	ИК	[17]
<chem>(MeO)2P(S)ONC(Me)Et</chem>	<chem>C6H14</chem>	298	1.370	21.1	44.6	*	
<chem>Ph3PS</chem>	<chem>CCl4</chem>	298	0.784	13.1	28.9	ИК	[26]
<chem>(Me2N)3PS</chem>	<chem>CCl4</chem>	298	1.190	16.4	32.2	ИК	[36]
	<chem>CCl4</chem>	298	1.188	16.4	32.2	ИК	[17]
<chem>Ph3PSe</chem>	<chem>CCl4</chem>	298	0.726	13.1	30.0	ИК	[26]
<chem>O=C(O)c1cc(C(=N)Nc2ccccc2)nc(Cl)c1C</chem>	<chem>CHCl3</chem>	298	0.587	22.6	88.7	ИК	[13]
<chem>Cn1ccccc1Se</chem>							
<chem>MeOc1ccc(cc1)Se</chem>	<chem>CCl4</chem>	313	1.670	16.3	20.1	ЯМР	[22]
	<chem>CCl4</chem>	298	1.807	16.3	20.1	**	
<chem>Et3N</chem>	<chem>C7H16</chem>	298	1.780	38.1	93.6	УФ	[37]
	<chem>C2H4Cl2</chem>	298	1.450	30.5	74.6	УФ	[37]
	<chem>C4H8O2</chem>	298	0.061	37.6	125	УФ	[37]
<chem>Bu3N</chem>	<chem>C7H16</chem>	298	1.340	43.9	123	УФ	[37]
	<chem>C6H14</chem>	298	1.590	28.9	66.9	ИК	[38]
	<chem>C6H6</chem>	298	1.180	26.8	66.9	ИК	[38]
	<chem>C2H4Cl2</chem>	298	0.785	45.8	138	УФ	[37]
<chem>Okt3N</chem>	<chem>C6H14</chem>	298	1.600	30.1	71.1	ИК	[38]
	<chem>C6H6</chem>	298	1.230	26.8	66.9	ИК	[38]
<chem>(CH2=CHCH2)3N</chem>	<chem>C7H16</chem>	298	1.100	41.8	119	УФ	[37]

	$C_2H_4Cl_2$	298	0.574	40.2	125	УФ	[37]
<chem>Me2NCH=NPh</chem>	C_6H_{12}	298	1.89	38.0	91.3	К, ИК	[39]
<chem>Me2NCH=N-Cl-C6H4-Cl</chem>	C_6H_{12}	298	1.75	38.0	93.9	К, ИК	[39]
<chem>Me2NCH=N-C6H4-Me</chem>	C_6H_{12}	298	1.99	37.5	87.7	К, ИК	[39]
<chem>Me2C=C(C#NMe2)N</chem>	CCl_4	300	2.280	31.3	60.7	ИК	[40]
<chem>CCl4</chem>	CCl_4	298	2.317	31.3	60.7	**	
<chem>N1C=CNMe=CN1</chem>	CCl_4	298	2.322	28.4	51.0	ИК	[15]
<chem>Me-N1C=CNMe=CN1</chem>	C_6H_6	298	2.484	32.5	61.4	К	[41]
<chem>Et-N1C=CNEt=CN1</chem>	CCl_4	298	2.591	29.3	48.6	ИК	[15]
<chem>Me-N1C=CN2=CC=CC=C2N1</chem>	CCl_4	298	2.079	27.2	51.4	ИК	[15]
<chem>CCl4</chem>	CCl_4	298	2.079	25.1	44.4	ИК	[15]
Py	C_7H_{16}	298	1.710	30.5	69.4	ИК	[42]
	C_6H_{12}	293	2.198	30.4	61.6	ИК	[43]
	C_6H_{12}	298	2.108	30.4	61.6	**	
	CCl_4	298	1.602	26.4	57.7	ИК	[15]
	CCl_4	298	1.649	31.8	75.1	К	[44]
	CCl_4	298	1.603	27.0	59.9	К	[45]
	CCl_4	293	1.925	25.0	48.4	ИК	[43]
	CCl_4	298	1.852	25.0	48.4	**	
	CCl_4	298	1.685	24.5	49.8	ИК	[46]
	CCl_4	298	1.555	31.4	75.6	ИК	[47]
	CCl_4	298	1.600	25.9	56.5	ИК	[48]

C_6H_6 293 1.394 21.0 44.9 ИК [43]

C_6H_6 298 1.334 21.0 44.9 **

C_6H_6 298 1.243 14.2 23.8 ИК [49]

CS_2 293 1.766 23.8 47.4 ИК [43]

CS_2 298 1.694 23.8 47.4 **

$CHCl_3$ 293 1.344 21.3 46.9 ИК [43]

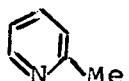
$CHCl_3$ 298 1.282 21.3 46.9 **

$C_2H_4Cl_2$ 293 1.260 23.2 55.0 ИК [43]

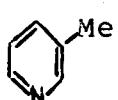
$C_2H_4Cl_2$ 298 1.192 23.2 55.0 **

$C_2H_4Cl_2$ 298 1.230 21.8 49.8 ИК [48]

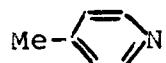
CCl_4 298 1.825 26.7 54.5 ИК [46]



C_6H_6 298 1.401 18.8 36.3 ИК [49]

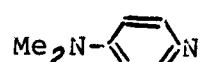


C_6H_6 298 1.480 15.9 25.0 ИК [49]

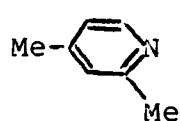


CCl_4 298 1.853 27.4 56.3 ИК [46]

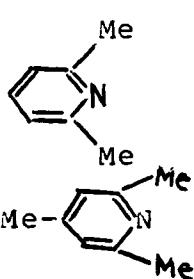
C_6H_6 298 1.459 20.1 39.4 ИК [49]



C_6H_6 298 1.944 23.8 42.6 ИК [49]



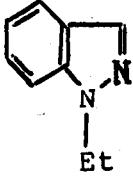
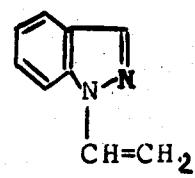
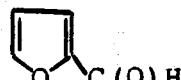
CCl_4 298 1.920 29.4 61.6 ИК [46]



CCl_4 298 2.029 30.7 64.1 ИК [46]

CCl_4 298 2.098 30.9 63.6 ИК [46]

	CCl ₄	298	1.327	27.9	68.2	ИК	[47]
	C ₂ H ₄ Cl ₂	298	0.815	20.9	54.5	ИК	[24]
	CCl ₄	298	1.193	26.9	67.4	ИК	[47]
	CCl ₄	298	1.047	26.4	68.6	ИК	[47]
	CCl ₄	293	1.750	20.1	34.3	ИК	[50]
	CCl ₄	298	1.732	20.1	34.3	**	
	CCl ₄	293	1.920	18.4	26.4	ИК	[50]
	CCl ₄	298	1.847	18.4	26.4	**	
	CCl ₄	293	2.030	19.2	27.6	ИК	[50]
	CCl ₄	298	1.924	19.2	27.6	**	
	CCl ₄	293	2.180	18.8	21.8	ИК	[50]
	CCl ₄	298	2.157	18.8	21.8	**	
	CCl ₄	293	1.170	14.6	28.4	ИК	[50]
	CCl ₄	298	1.076	14.6	28.4	**	
	CCl ₄	293	1.440	16.3	29.7	ИК	[50]
	CCl ₄	298	1.306	16.3	29.7	**	
	CCl ₄	293	1.410	17.2	32.2	ИК	[50]
	CCl ₄	298	1.333	17.2	32.2	**	
	CCl ₄	293	1.490	19.7	41.4	ИК	[50]
	CCl ₄	298	1.291	19.7	41.4	**	

	CCl ₄	293	1.830	16.3	20.5	ИК	[50]
	CCl ₄	298	1.787	16.3	20.5	**	
	CCl ₄	293	1.440	11.3	10.9	ИК	[50]
	CCl ₄	298	1.412	11.3	10.9	**	
MeCN	C ₂ Cl ₄	298	0.829	22.5	59.8	ИК	[51]
Me ₃ CCN	C ₂ Cl ₄	298	0.902	21.4	54.8	ИК	[51]
CCl ₃ CN	C ₂ Cl ₄	298	-0.174	12.7	46.0	ИК	[51]
PhCN	C ₂ Cl ₄	298	0.649	20.4	56.1	ИК	[51]
Bu ₃ P	C ₆ H ₁₄	298	3.480	35.6	50.2	ИК	[38]
	C ₆ H ₆	298	2.950	29.3	41.8	ИК	[38]
Okt ₃ P	C ₆ H ₁₄	298	3.480	35.6	50.2	ИК	[38]
	C ₆ H ₆	298	2.900	29.7	46.0	ИК	[38]
<u>2-Me-C₆H₄OH</u>							
	CCl ₄	298	0.610	11.6	27.2	ИК	[11]
PrNH ₂	C ₆ H ₁₂	298	2.008	34.1	76.1	УФ	[52]
i-PrNH ₂	C ₆ H ₁₂	298	1.759	28.4	61.6	УФ	[52]
t-BuNH ₂	C ₆ H ₁₂	298	1.759	38.9	96.8	УФ	[52]
Et ₂ NH	C ₆ H ₁₂	298	1.942	28.4	58.1	УФ	[52]
Bu ₂ NH	C ₆ H ₁₂	298	1.876	28.9	61.0	УФ	[52]
Pr ₃ N	C ₆ H ₁₂	298	1.114	25.1	62.8	УФ	[52]
Bu ₃ N	C ₆ H ₁₂	298	1.165	27.6	70.3	УФ	[52]
O-C ₆ H ₄ NH	C ₆ H ₁₂	298	1.693	29.2	65.3	УФ	[52]
O-C ₆ H ₄ NET	C ₆ H ₁₂	298	1.495	28.4	66.6	УФ	[52]

2-(2-Bu)-C₆H₄OH

PrNH ₂	C ₆ H ₁₂	298	1.920	33.5	75.7	уФ	[52]
i-PrNH ₂	C ₆ H ₁₂	298	1.979	26.0	49.4	уФ	[52]
BuNH ₂	C ₆ H ₁₂	298	2.008	35.5	80.8	уФ	[52]
t-BuNH ₂	C ₆ H ₁₂	298	1.906	32.2	71.5	уФ	[52]
Et ₂ NH	C ₆ H ₁₂	298	1.994	31.4	66.9	уФ	[52]
Bu ₂ NH	C ₆ H ₁₂	298	1.869	30.2	65.3	уФ	[52]
Et ₃ N	C ₆ H ₁₂	298	1.664	35.2	86.3	уФ	[52]
Pr ₃ N	C ₆ H ₁₂	298	1.239	28.9	73.3	уФ	[52]
Bu ₃ N	C ₆ H ₁₂	298	1.092	25.1	63.2	уФ	[52]
O  NH	C ₆ H ₁₂	298	1.737	30.8	69.9	уФ	[52]
O  NET	C ₆ H ₁₂	298	1.488	27.1	62.3	уФ	[52]
HN  NH	C ₆ H ₁₂	298	2.089	32.0	67.4	уФ	[52]

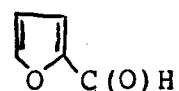
2-Cl-C₆H₄OH

Et ₃ N	C ₇ H ₁₆	297	0.929	34.4	98.0	уФ	[37]
	C ₇ H ₁₆	298	0.911	34.4	98.0	**	
	C ₂ H ₄ Cl ₂	295	1.110	30.5	82.1	уФ	[37]
	C ₂ H ₄ Cl ₂	298	1.058	30.5	82.1	**	
Bu ₃ N	C ₇ H ₁₆	293	0.477	30.5	94.9	уФ	[37]
	C ₇ H ₁₆	298	0.389	30.5	94.9	**	
	C ₂ H ₄ Cl ₂	293	0.806	26.8	76.0	уФ	[37]
	C ₂ H ₄ Cl ₂	298	0.728	26.8	76.0	**	
(CH ₂ =CHCH ₂) ₃ N	C ₇ H ₁₆	298	0.602	36.3	110	уФ	[37]
	C ₂ H ₄ Cl ₂	299	0.362	36.4	115	уФ	[37]
	C ₂ H ₄ Cl ₂	298	0.374	36.4	115	**	
Py	C ₇ H ₁₆	298	1.061	24.3	61.0	ИК	[42]

	CCl_4	298	0.908	20.9	52.7	ИК	[48]
	$\text{C}_2\text{H}_4\text{Cl}_2$	298	0.750	20.9	55.6	ИК	[48]
<u>2-МеO-$\text{C}_6\text{H}_4\text{OH}$</u>							
Me_2SO	C_6H_{12}	293	0.939	15.8	35.9	ИК	[30]
	C_6H_{12}	298	0.893	15.8	35.9	**	
	CCl_4	293	0.613	12.7	31.6	ИК	[30]
	CCl_4	298	0.574	12.7	31.6	**	
	CS_2	293	0.741	18.8	49.9	ИК	[30]
	CS_2	298	0.687	18.8	49.9	**	
	C_6H_6	293	0.612	16.2	43.6	ИК	[30]
	C_6H_6	298	0.561	16.2	43.6	**	
	$\text{C}_2\text{H}_4\text{Cl}_2$	293	0.270	14.4	44.0	ИК	[30]
	$\text{C}_2\text{H}_4\text{Cl}_2$	298	0.224	14.4	44.0	**	
	CHCl_3	293	-0.066	8.7	31.1	ИК	[30]
	CHCl_3	298	-0.100	8.7	31.1	**	
Py	C_6H_{12}	293	0.549	11.8	29.7	ИК	[43]
	C_6H_{12}	298	0.516	11.8	29.7	**	
	CCl_4	293	0.558	13.7	36.0	ИК	[43]
	CCl_4	298	0.520	13.7	36.0	**	
	CS_2	293	0.364	11.9	33.6	ИК	[43]
	CS_2	298	0.330	11.9	33.6	**	
	C_6H_6	293	0.324	12.2	35.4	ИК	[43]
	C_6H_6	298	0.288	12.2	35.4	**	
	$\text{C}_2\text{H}_4\text{Cl}_2$	293	0.474	10.2	25.7	ИК	[43]
	$\text{C}_2\text{H}_4\text{Cl}_2$	298	0.444	10.2	25.7	**	
	CHCl_3	293	0.484	9.3	22.4	ИК	[43]
	CHCl_3	298	0.459	9.3	22.4	**	
<u>2-NO₂-$\text{C}_6\text{H}_4\text{OH}$</u>							
	C_6H_{12}	295	-0.481	2.8	18.8	УФ	[63]

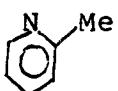
C₆H₁₂ 298 -0.491 2.8 18.8 **

3-Me-C₆H₄OH

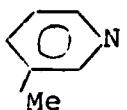


CCl₄ 298 0.669 14.9 37.2 ИК [11]

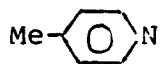
PY C₆H₆ 298 1.215 12.6 19.0 ИК [49]



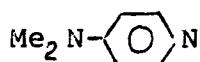
C₆H₆ 298 1.243 16.7 32.3 ИК [49]



C₆H₆ 298 1.322 13.8 21.0 ИК [49]

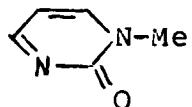


C₆H₆ 298 1.377 17.6 32.6 ИК [49]

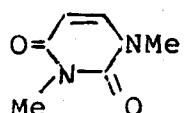


C₆H₆ 298 1.894 19.2 28.3 ИК [49]

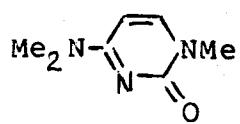
3-F-C₆H₄OH



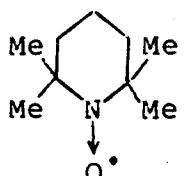
C₂H₄Cl₂ 298 1.618 27.9 62.6 ИК [24]



CCl₄ 298 2.006 26.0 48.8 ИК [24]



C₂H₄Cl₂ 298 2.563 37.2 75.7 ИК [24]

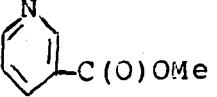
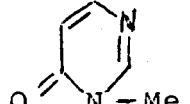
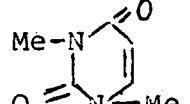
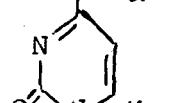
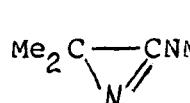
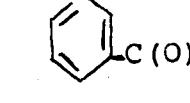
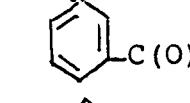
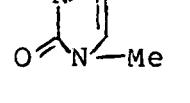
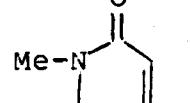
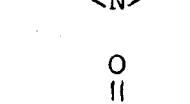
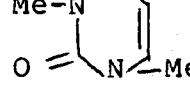
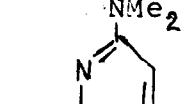
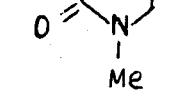


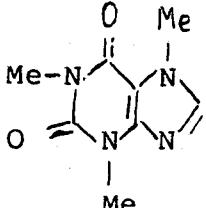
CCl₄ 298 1.859 25.9 51.3 ЭПР [53]



C₂H₄Cl₂ 298 1.020 22.7 56.6 ИК [24]

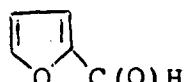
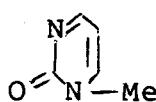
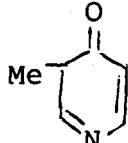
3-Cl-C₆H₄OH

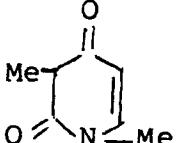
	CCl ₄	293	1.803	21.4	38.5	ИК	[20]
Py 	C ₇ H ₁₆	298	2.490	39.3	84.1	ИК	[42]
	C ₂ H ₄ Cl ₂	298	1.478	25.4	56.9	ИК	[24]
	CCl ₄	298	2.036	26.2	48.9	ИК	[24]
	C ₂ H ₄ Cl ₂	298	1.295	24.0	55.7	ИК	[24]
	C ₂ H ₄ Cl ₂	298	2.618	37.9	77.0	ИК	[24]
	CCl ₄	300	2.720	32.2	55.3	ИК	[40]
	CCl ₄	298	2.756	32.2	55.3	**	
<u>3-Br-C₆H₄OH</u>							
	CCl ₄	295	2.580	26.9	41.7	ИК	[19]
	CCl ₄	298	2.538	26.9	41.7	**	
	CCl ₄	293	1.846	21.7	38.7	ИК	[20]
	CCl ₄	298	1.783	21.7	38.7	**	
	C ₂ H ₄ Cl ₂	298	1.700	28.6	63.4	ИК	[24]
	C ₂ H ₄ Cl ₂	298	1.508	25.6	57.0	ИК	[24]
	CCl ₄	298	2.083	26.5	49.0	ИК	[24]
	C ₂ H ₄ Cl ₂	298	1.342	24.2	55.9		
	C ₂ H ₄ Cl ₂	298	2.678	38.6	78.2	ИК	[24]

	C ₂ H ₄ Cl ₂	298	1.320	18.3	36.7	ИК	[25]
---	---	-----	-------	------	------	----	------

	CCl ₄	300	2.840	33.4	57.0	ИК	[40]
	CCl ₄	298	2.878	33.4	57.0	**	
	C ₂ H ₄ Cl ₂	298	1.080	23.1	56.8	ИК	[24]

<u>3-OH-C₆H₄OH</u>							
Et ₂ O	CCl ₄	298	1.398	25.5	58.8	ИК	[35]
	CCl ₄	293	1.672	23.4	47.9	ИК	[35]
	CCl ₄	298	1.597	23.4	47.9	**	
Bu ₂ S	CCl ₄	293	0.699	15.9	40.9	ИК	[35]
	CCl ₄	298	0.649	15.9	40.9	**	
	CCl ₄	293	0.519	19.2	55.8	ИК	[35]
	CCl ₄	298	0.449	19.2	55.8	**	

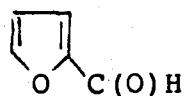
<u>3-NO₂-C₆H₄OH</u>							
	CCl ₄	298	1.469	24.9	55.2	ИК	[11]
	C ₂ H ₄ Cl ₂	298	2.020	31.3	66.3	ИК	[24]
	C ₂ H ₄ Cl ₂	298	1.739	27.1	57.6	ИК	[24]

	CCl ₄	298	2.376	28.5	50.1	ИК	[24]
	C ₂ H ₄ Cl ₂	298	1.539	25.9	57.4	ИК	[24]
Py	CCl ₄	298	2.630	35.1	67.4	ИК	[48]
	C ₂ H ₄ Cl ₂	298	1.850	24.7	47.3	ИК	[48]
	C ₂ H ₄ Cl ₂	298	1.288	25.0	59.2	ИК	[24]

4-Me-C₆H₄OH

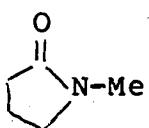
4-Me-C ₆ H ₄ OH	CCl ₄	303	0.356	24.7	74.7	ИК
	CCl ₄	298	0.423	24.7	74.7	**

MeOPh	CCl ₄	303	0.124	13.8	43.2	ИК
	CCl ₄	298	0.162	13.8	43.2	**



Me ₂ NC(O)NMe ₂	CCl ₄	298	2.037	27.7	53.9	ИК
---------------------------------------	------------------	-----	-------	------	------	----

PhC(O)CH=CHNMe ₂	C ₆ H ₆	298	2.060	23.5	39.6	К
	CCl ₄	298	2.067	25.9	47.3	ИК



	CCl ₄	298	0.744	15.3	37.1	ИК
	CCl ₄	298	1.185	17.9	37.3	ИК

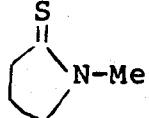
(Me ₂ N) ₃ PO	CCl ₄	298	3.160	29.9	40.0	ИК
	CCl ₄	298	3.140	31.5	45.5	ИК

MeS(O)Me	CCl ₄	298	2.176	23.2	36.2	ИК
PhS(O)Ph	CCl ₄	298	1.645	20.8	38.3	ИК

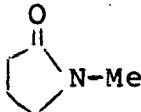
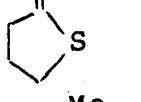
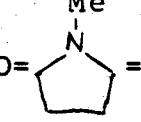
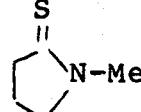
Me ₂ NS(O)Me	CCl ₄	298	2.033	21.8	34.2	ИК
Me ₂ NS(O)Ph	CCl ₄	298	1.773	21.2	37.2	ИК

MeNHSO ₂ Me	CCl ₄	298	1.104	14.6	27.8	ИК
Me ₂ NSO ₂ Me	CCl ₄	298	1.077	17.0	36.4	ИК

Me ₂ NC(S)Me	CCl ₄	298	0.952	15.9	35.1	ИК
	CCl ₄	298	1.080	15.2	30.3	ИК



$(\text{NMe}_2)_3\text{PS}$	CCl_4	298	1.083	15.9	32.5	ИК	[17]
$\text{Me}_2\text{NC(S)NMe}_2$	CCl_4	298	1.057	17.8	39.4	ИК	[17]
$\text{PhC(O)(CH}_2)_2\text{NMe}_2$	C_6H_6	298	1.810	29.7	65.1	К	[23]
$\text{Me}_2\text{NCH=NPPh}$	C_6H_{12}	298	1.760	37.5	92.1	К, ИК	[39]
$\text{Me}_2\text{NCH=N}-\langle\text{O}\rangle-\text{Me}$	C_6H_{12}	298	1.860	38.5	93.5	К, ИК	[39]
	C_6H_6	298	2.369	31.2	59.3	К	[41]
PrNH_2	C_6H_{12}	298	1.891	36.3	85.5	УФ	[52]
$i\text{-PrNH}_2$	C_6H_{12}	298	1.961	34.5	78.2	УФ	[52]
BuNH_2	C_6H_{12}	298	1.766	33.8	79.5	УФ	[52]
$t\text{-BuNH}_2$	C_6H_{12}	298	1.994	32.3	70.3	УФ	[52]
Et_3N	C_6H_{12}	298	1.774	30.3	67.8	УФ	[52]
Py	C_7H_{16}	298	1.631	30.5	71.1	ИК	[42]
	C_6H_6	298	1.140	12.1	18.8	ИК	[49]
	C_6H_6	298	1.352	19.7	40.1	ИК	[49]
	C_6H_6	298	1.262	13.0	19.3	ИК	[49]
	C_6H_6	298	1.279	15.5	27.5	ИК	[49]
$\text{Me}_2\text{N}-\langle\text{O}\rangle-\text{N}$	C_6H_6	298	1.833	18.0	25.3	ИК	[49]
	C_6H_{12}	298	1.752	24.7	49.3	УФ	[52]
	C_6H_{12}	298	1.466	28.3	66.9	УФ	[52]
	CCl_4	300	2.160	30.1	59.0	ИК	[40]
	CCl_4	298	2.195	30.1	59.0	**	
$\text{Me}_2\text{NC(S)NMe}_2$	CCl_4	298	1.057	17.8	39.5	ИК	[17]

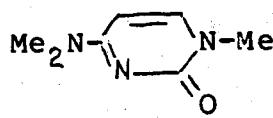
$(\text{Me}_2\text{N})_3\text{PO}$	CCl_4	298	3.140	31.5	45.5	ИК	[36]
$(\text{Me}_2\text{N})_3\text{PS}$	CCl_4	298	1.088	15.9	32.5	ИК	[36]
<u>$4-(2-\text{Bu})-\text{C}_6\text{H}_4\text{OH}$</u>							
$\text{Me}_2\text{NC(O)NMe}_2$	CCl_4	298	2.030	23.9	41.3	ИК	[17]
	CCl_4	298	2.165	24.7	41.4	ИК	[17]
	CCl_4	298	0.738	15.9	39.2	ИК	[17]
	CCl_4	298	1.203	17.6	36.0	ИК	[17]
MeS(O)Me	CCl_4	298	2.188	23.0	35.3	ИК	[31]
$\text{Me}_2\text{NS(O)Me}$	CCl_4	298	2.053	21.4	32.5	ИК	[31]
PhS(O)Ph	CCl_4	298	1.632	20.9	38.8	ИК	[33]
$\text{Me}_2\text{NS(O)Ph}$	CCl_4	298	1.708	21.3	38.7	ИК	[33]
MeNHSO_2Me	CCl_4	298	1.090	15.7	31.8	ИК	[34]
$\text{Me}_2\text{NSO}_2\text{Me}$	CCl_4	298	1.057	17.7	39.1	ИК	[21]
$\cdot(\text{Me}_2\text{N})_3\text{PO}$	CCl_4	298	3.129	32.8	50.1	ИК	[17]
$\text{Me}_2\text{NC(S)Me}$	CCl_4	298	0.956	16.5	37.0	ИК	[17]
$\text{Me}_2\text{NC(S)NMe}_2$	CCl_4	298	1.064	16.6	35.3	ИК	[17]
	CCl_4	298	1.097	17.8	38.7	ИК	[17]
$(\text{Me}_2\text{N})_3\text{PS}$	CCl_4	298	1.074	16.0	33.1	ИК	[36]
	C_6H_6	298	2.375	31.2	59.2	К	[41]
<u>$4-t\text{-Bu-C}_6\text{H}_4\text{OH}$</u>							
$4-t\text{-Bu-C}_6\text{H}_4\text{OH}$	CCl_4	303	0.290	27.2	84.2	ИК	[9]
	CCl_4	298	0.370	27.2	84.2	**	

MeOPh	CCl ₄	303	0.137	13.4	41.5	ИК	[9]
	CCl ₄	298	0.178	13.4	41.5	**	
MeC(O)Me	C ₆ H ₆	298	0.491	18.4	52.3	K	[23]
MeC(O)Ph	C ₆ H ₆	298	0.973	14.2	29.0	K	[23]
MeC(O)NET ₂	C ₆ H ₁₂	298	2.332	34.9	72.4	K	[18]
PhC(O)CH=CHNMe ₂	C ₆ H ₆	298	1.940	21.6	35.2	K	[23]
	CCl ₄	293	1.281	18.3	37.9	ИК	[20]
	CCl ₄	298	1.227	18.3	37.9	**	
	C ₆ H ₆	298	2.375	31.2	59.2	K	[41]

4-F-C₆H₄OH

4-F-C ₆ H ₄ OH	CCl ₄	303	-0.081	23.0	77.4	ИК	[9]
	CCl ₄	298	-0.011	23.0	77.4	**	
MeOPh	CCl ₄	303	0.283	9.6	26.3	ИК	[9]
	CCl ₄	298	0.309	9.6	26.3	**	
MeC(O)NMe ₂	C ₆ H ₁₂	298	2.602	35.8	70.3	K	[18]
	C ₆ H ₆	298	1.940	29.1	60.4	K	[23]
PhC(O)(CH ₂) ₂ NMe ₂	C ₆ H ₆	298	1.820	31.4	70.5	K	[23]
PhC(O)CH=CHNMe ₂	C ₆ H ₆	298	2.160	24.7	41.6	K	[23]
	CCl ₄	293	1.525	19.5	37.4	ИК	[20]
	CCl ₄	298	1.465	19.5	37.4	**	
	C ₂ H ₄ Cl ₂	298	1.353	25.7	60.3	ИК	[24]
	C ₂ H ₄ Cl ₂	298	1.241	23.9	56.4	ИК	[24]
	CCl ₄	298	1.750	24.3	48.0	ИК	[24]

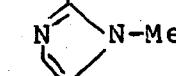
$C_2H_4Cl_2$ 298 1.088 22.4 54.3 ИК [24]

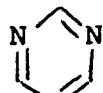
 $C_2H_4Cl_2$ 298 2.143 32.5 67.9 ИК [24]

Oct₃PO C_6H_{12} 298 3.903 43.2 70.2 К [18]

(Me₂N)₃PO CCl_4 298 3.680 32.3 38.1 ИК [29]

 CCl_4 298 1.454 23.6 51.0 ЭПР [53]

 C_6H_6 298 2.748 32.1 55.0 К [41]

 $C_2H_4Cl_2$ 298 0.846 21.2 54.9 ИК [24]

MeCN CCl_4 293 0.924 25.3 68.6 ИК [71]

CCl_4 298 0.844 25.3 68.6 **

 CCl_4 293 0.954 24.8 66.3 ИК [71]

CCl_4 298 0.882 24.8 66.3 **

CCl₃CN CCl_4 293 -0.468 7.0 32.8 ИК [71]

CCl_4 298 -0.497 7.0 32.8 **

PhCN CCl_4 293 0.785 22.4 61.3 ИК [71]

CCl_4 298 0.722 22.4 61.3 **

4-F-C₆H₄CN CCl_4 293 0.633 20.1 56.4 ИК [71]

CCl_4 298 0.575 20.1 56.4 **

3-CF₃-C₆H₄CN CCl_4 293 0.580 19.6 55.8 ИК [71]

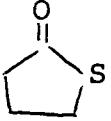
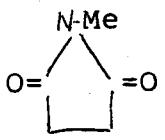
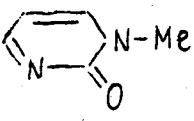
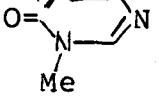
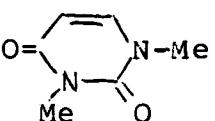
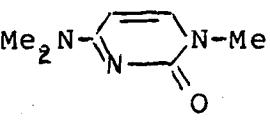
CCl_4 298 0.519 19.6 55.8 **

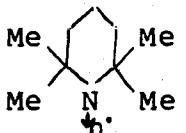
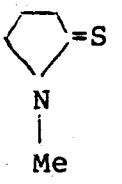
C₆F₅CN CCl_4 293 0.041 11.9 39.7 ИК [71]

CCl_4 298 0.011 11.9 39.7 **

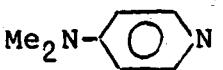
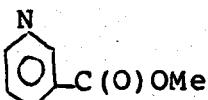
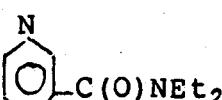
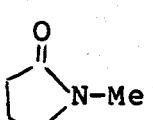
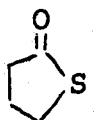
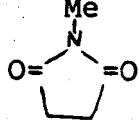
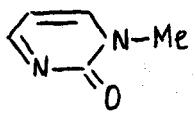
MeSCN CCl_4 293 0.613 21.6 62.0 ИК [71]

CCl_4 298 0.546 21.6 62.0 **

<chem>Ph2PCN</chem>	<chem>CCl4</chem>	293	0.863	21.6	57.3	ИК	[71]
	<chem>CCl4</chem>	298	0.791	21.6	57.3	**	
<chem>Me3SiCN</chem>	<chem>CCl4</chem>	293	1.000	24.1	62.9	ИК	[71]
	<chem>CCl4</chem>	298	0.937	24.1	62.9	**	
	<u>4-Cl-C₆H₄OH</u>						
<chem>4-Cl-C6H4OH</chem>	<chem>CCl4</chem>	303	-0.585	22.6	85.8	ИК	[9]
	<chem>CCl4</chem>	298	-0.520	22.6	85.8	**	
<chem>BuOBu</chem>	<chem>C6H12</chem>	298	1.255	27.0	66.5	К	[18]
<chem>MeOPh</chem>	<chem>CCl4</chem>	303	0.143	16.3	51.1	ИК	[9]
	<chem>CCl4</chem>	298	0.188	16.3	51.1	**	
<chem>Me2NC(=O)NMe2</chem>	<chem>CCl4</chem>	298	2.624	28.4	45.0	ИК	[17]
	<chem>C6H6</chem>	298	1.930	29.0	60.4	К	[23]
	<chem>CCl4</chem>	298	1.079	17.6	38.3	ИК	[17]
	<chem>CCl4</chem>	298	1.453	18.7	34.9	ИК	[17]
	<chem>C2H4Cl2</chem>	298	1.544	27.3	62.0	ИК	[24]
	<chem>C2H4Cl2</chem>	298	1.383	24.8	56.7	ИК	[24]
	<chem>CCl4</chem>	298	1.934	25.5	48.5	ИК	[24]
	<chem>C2H4Cl2</chem>	298	1.216	23.4	55.2	ИК	[24]
	<chem>C2H4Cl2</chem>	298	2.433	35.8	73.5	ИК	[24]

<chem>CS(=O)C</chem>	<chem>CCl4</chem>	298	2.703	25.7	34.4	ИК	[31]
<chem>PhS(=O)Ph</chem>	<chem>CCl4</chem>	298	2.233	24.4	39.1	ИК	[33]
<chem>Me2NS(=O)Me</chem>	<chem>CCl4</chem>	298	2.545	25.7	37.6	ИК	[31]
<chem>Me2NS(=O)Ph</chem>	<chem>CCl4</chem>	298	2.297	24.3	37.6	ИК	[33]
<chem>MeNHSO2Me</chem>	<chem>CCl4</chem>	298	1.380	16.5	28.8	ИК	[34]
<chem>Me2NSO2Me</chem>	<chem>CCl4</chem>	298	1.444	17.9	32.4	ИК	[21]
<chem>(Me2N)3PO</chem>	<chem>CCl4</chem>	298	3.920	33.5	35.2	ИК	[29]
	<chem>CCl4</chem>	298	3.941	34.9	41.6	ИК	[17]
	<chem>CCl4</chem>	298	1.620	25.9	55.8	ЭПР	[53]
<chem>Me2NC(S)Me</chem>	<chem>CCl4</chem>	298	1.318	17.9	34.8	ИК	[17]
<chem>Me2NC(S)NMe2</chem>	<chem>CCl4</chem>	298	1.456	19.4	37.2	ИК	[17]
	<chem>CCl4</chem>	298	1.500	18.2	32.4	ИК	[10]
<chem>(Me2N)3PS</chem>	<chem>CCl4</chem>	298	1.450	17.7	31.6	ИК	[17]
<chem>BuOBu</chem>	<chem>C6H12</chem>	298	1.255	27.0	66.5	К	[18]
<chem>Et3N</chem>	<chem>C7H16</chem>	298	1.748	41.4	105	К	[56]
	<chem>C7H16</chem>	298	2.267	43.9	104	УФ	[37]
	<chem>C6H6</chem>	298	1.412	38.9	103	К	[56]
	<chem>C2H4Cl2</chem>	298	1.819	40.2	100	УФ	[37]
	<chem>C4H8O2</chem>	298	0.699	41.8	132	УФ	[37]
<chem>Bu3N</chem>	<chem>C7H16</chem>	296	1.670	45.6	122	УФ	[37]
	<chem>C7H16</chem>	298	1.621	45.6	122	**	
	<chem>C2H4Cl2</chem>	293	1.300	34.7	93.5	УФ	[37]
	<chem>C2H4Cl2</chem>	298	1.198	34.7	93.5	**	
<chem>(CH2=CHCH2)3N</chem>	<chem>C7H16</chem>	298	1.490	43.0	116	УФ	[37]
	<chem>C2H4Cl2</chem>	296	0.863	43.9	132	УФ	[37]
	<chem>C2H4Cl2</chem>	298	0.800	43.9	132	**	

<chem>PhC(=O)(CH2)2NMe2</chem>	<chem>C6H6</chem>	298	1.870	34.1	78.5	K	[23]
<chem>PhC(=O)CH=CHNMe2</chem>	<chem>C6H6</chem>	298	2.190	25.3	43.0	K	[23]
	<chem>C2H4Cl2</chem>	298	0.991	22.3	56.1	ИК	[24]
	<chem>CCl4</chem>	298	2.688	27.2	40.2	ИК	[17]
<chem>(Me2N)3PS</chem>	<chem>CCl4</chem>	298	1.450	17.7	31.6	ИК	[36]
<chem>Me2NCH=NPh</chem>	<chem>C6H12</chem>	298	2.300	40.0	90.1	K, ИК	[39]
<chem>Me2NCH=N-C6H4-Me</chem>	<chem>C6H12</chem>	298	2.360	41.5	94.0	K, ИК	[39]
<chem>Me2NCH=N-C6H4-Cl</chem>	<chem>C6H12</chem>	298	1.970	38.5	91.4	K, ИК	[39]
	<chem>CCl4</chem>	300	2.630	32.6	58.3	ИК	[40]
	<chem>CCl4</chem>	298	2.670	32.6	58.3	**	
	<chem>C6H6</chem>	298	2.826	33.4	57.9	K	[41]
	<chem>C2Cl4</chem>	298	0.919	25.4	67.8	ИК	[51]
<chem>t-BuCN</chem>	<chem>C2Cl4</chem>	298	1.160	24.1	59.0	ИК	[51]
<chem>PhCN</chem>	<chem>C2Cl4</chem>	298	0.893	22.5	58.2	ИК	[51]
<chem>Cl3CCN</chem>	<chem>C2Cl4</chem>	298	0.072	13.7	44.4	ИК	[51]
<chem>Py</chem>	<chem>C8H18</chem>	298	2.281	39.3	88.1	K	[56]
	<chem>C7H16</chem>	298	2.072	35.6	79.8	ИК	[42]
	<chem>C6H6</chem>	298	1.607	27.2	60.4	K	[56]
	<chem>C6H6</chem>	298	1.480	20.1	39.1	ИК	[49]
	<chem>CCl4</chem>	298	1.950	28.9	59.0	ИК	[48]
	<chem>C2H4Cl2</chem>	298	1.490	23.0	48.5	ИК	[48]
	<chem>C6H6</chem>	298	1.555	20.9	40.4	ИК	[49]
	<chem>C6H6</chem>	298	1.661	20.9	38.4	ИК	[49]

	C_6H_6	298	1.630	19.2	33.3	ИК	[49]
	C_6H_6	298	2.161	25.9	45.5	ИК	[49]
<u>4-Br-C₆H₄OH</u>							
4-Br-C ₆ H ₄ OH	CCl ₄	303	-0.620	22.2	85.1	ИК	[9]
	CCl ₄	298	-0.554	22.2	85.1	**	
MeOPh	CCl ₄	303	0.137	15.9	49.8	ИК	[9]
	CCl ₄	298	0.186	15.9	49.8	**	
MeC(O)Me	C_6H_6	298	0.724	20.5	54.9	K	[23]
MeC(O)Ph	C_6H_6	298	0.832	14.7	33.4	K	[23]
MeC(O)NMe ₂	C_6H_6	298	2.130	27.0	50.0	K	[23]
Me ₂ NC(O)NMe ₂	CCl ₄	298	2.656	26.1	36.7	ИК	[17]
	C_6H_6	298	2.270	26.9	47.0	K	[23]
	CCl ₄	293	1.713	20.8	38.2	ИК	[20]
	CCl ₄	298	1.651	20.8	38.2	**	
	CCl ₄	295	2.410	25.2	39.3	ИК	[19]
	CCl ₄	298	2.365	25.2	39.3	**	
	CCl ₄	298	2.705	26.8	38.1	ИК	[17]
	CCl ₄	298	1.110	17.5	37.4	ИК	[17]
	CCl ₄	298	1.491	19.7	37.7	ИК	[17]
	$C_2H_4Cl_2$	298	1.569	27.5	62.2	ИК	[24]

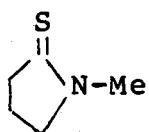
	$C_2H_4Cl_2$	298	1.400	24.9	56.7	ИК	[24]
	CCl_4	298	1.946	25.6	48.6	ИК	[24]
	$C_2H_4Cl_2$	298	1.233	23.5	55.3	ИК	[24]
	$C_2H_4Cl_2$	298	2.458	36.1	74.0	ИК	[24]
	$C_2H_4Cl_2$	298	1.274	17.6	34.6	ИК	[25]
MeS(O)Me	CCl_4	298	2.770	25.9	33.9	ИК	[31]
PhS(O)Ph	CCl_4	298	2.228	24.9	40.9	ИК	[33]
Me ₂ NS(O)Me	CCl_4	298	2.555	26.1	38.6	ИК	[31]
Me ₂ NS(O)Ph	CCl_4	298	2.356	25.1	38.9	ИК	[33]
MeNHSO ₂ Me	CCl_4	298	1.415	17.4	31.3	ИК	[34]
Me ₂ NSO ₂ Me	CCl_4	298	1.438	18.3	33.8	ИК	[21]
(Me ₂ N) ₃ PO	CCl_4	298	3.910	32.9	35.5	ИК	[29]
	CCl_4	298	3.922	34.5	40.5	ИК	[36]
	CCl_4	298	1.717	24.9	50.6	ЭПР	[53]
Me ₂ NC(S)Me	CCl_4	298	1.372	18.3	35.1	ИК	[17]
Me ₂ NC(S)NMe ₂	CCl_4	298	1.498	20.3	39.4	ИК	[17]
	CCl_4	298	1.524	18.6	33.3	ИК	[17]
(Me ₂ N) ₃ PO	CCl_4	298	3.924	34.5	40.5	ИК	[17]

	CCl ₄	298	3.915	32.9	35.5	ИК	[29]
(Me ₂ N) ₃ PS	CCl ₄	298	1.490	17.1	28.9	ИК	[36]
Et ₃ N	C ₈ H ₁₈	298	1.944	41.8	103	К	[56]
	C ₆ H ₆	298	1.737	37.6	92.8	К	[56]
	C ₆ H ₆	298	2.934	32.5	52.8	К	[41]
Py	C ₇ H ₁₆	298	2.161	37.7	85.1	ИК	[42]
	C ₈ H ₁₈	298	2.262	33.5	69.0	К	[56]
	CCl ₄	298	1.990	28.0	55.2	ИК	[48]
	C ₆ H ₆	298	1.518	28.9	67.8	К	[56]
	C ₂ H ₄ Cl ₂	298	1.500	23.0	48.5	ИК	[48]
	C ₂ H ₄ Cl ₂	298	0.984	22.4	56.3	ИК	[24]

4-J-C₆H₄OH

Me ₂ NC(O)NMe ₂	CCl ₄	298	2.658	28.7	45.4	ИК	[17]
	CCl ₄	298	2.704	25.9	35.1	ИК	[17]
	CCl ₄	298	1.101	18.3	40.3	ИК	[17]
	CCl ₄	298	1.489	20.1	38.9	ИК	[17]
MeS(O)Me	CCl ₄	298	2.826	25.7	32.2	ИК	[31]
PhS(O)Ph	CCl ₄	298	2.262	24.8	39.9	ИК	[33]
Me ₂ NS(O)Me	CCl ₄	298	2.575	25.3	35.6	ИК	[31]
Me ₂ NS(O)Ph	CCl ₄	298	2.360	25.4	39.9	ИК	[33]

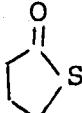
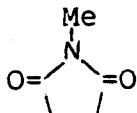
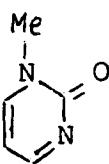
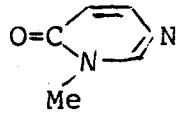
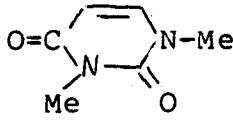
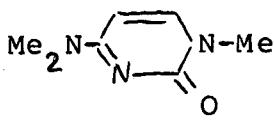
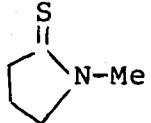
$(Me_2N)_3PO$	CCl_4	298	3.959	35.0	41.6	ИК	[36]
$PhC(O)(CH_2)_2NMe_2$	C_6H_6	298	1.870	32.5	73.2	К	[23]
$PhC(O)CH=CHNMe_2$	C_6H_6	298	2.200	24.5	39.9	ИК	[23]
$MeNHSO_2Me$	CCl_4	298	1.430	17.0	29.5	ИК	[34]
Me_2NSO_2Me	CCl_4	298	1.459	17.6	31.1	ИК	[21]
$Me_2NC(S)Me$	CCl_4	298	1.375	18.2	34.8	ИК	[17]
$Me_2NC(S)NMe_2$	CCl_4	298	1.523	19.1	34.9	ИК	[17]

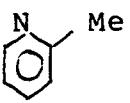
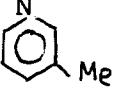
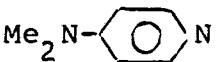
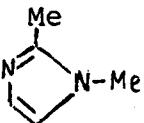
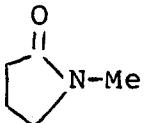
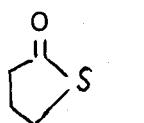


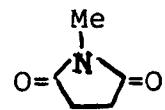
$(Me_2N)_3PO$	CCl_4	298	3.955	35.0	41.6	ИК	[17]
$(Me_2N)_3PS$	CCl_4	298	1.480	17.7	31.0	ИК	[36]
$Me_2C\begin{smallmatrix} \diagdown \\ \diagup \end{smallmatrix} CNMe_2$	CCl_4	300	2.770	31.8	53.0	ИК	[40]
	CCl_4	298	2.807	31.8	53.0	**	
Py	C_7H_{16}	298	2.170	37.2	83.1	ИК	[42]
	CCl_4	298	1.980	28.0	56.1	ИК	[48]
	$C_2H_4Cl_2$	298	1.496	21.8	44.4	ИК	[48]

4-MeO-C₆H₄OH

$4-MeO-C_6H_4OH$	CCl_4	303	0.531	32.6	97.5	ИК	[9]
	CCl_4	298	0.626	32.6	97.5	**	
MeOPh	CCl_4	303	0.233	15.9	48.0	ИК	[9]
	CCl_4	298	0.280	15.9	48.0	**	
$Me_2NC(O)NMe_2$	CCl_4	298	2.038	25.5	46.5	ИК	[17]
	CCl_4	295	1.980	20.5	31.5	ИК	[19]
	CCl_4	298	1.949	20.5	31.5	**	
	CCl_4	298	2.122	27.2	50.6	ИК	[17]

	CCl ₄	298	0.751	15.6	37.9	ИК	[17]
	CCl ₄	298	1.204	17.8	36.6	ИК	[17]
	C ₂ H ₄ Cl ₂	298	1.191	24.3	58.7	ИК	[24]
	C ₂ H ₄ Cl ₂	298	1.117	23.1	56.1	ИК	[24]
	CCl ₄	298	1.588	23.2	47.4	ИК	[24]
	C ₂ H ₄ Cl ₂	298	0.949	21.4	53.5	ИК	[24]
	C ₂ H ₄ Cl ₂	298	1.857	29.3	62.7	ИК	[24]
MeS(O)Me	CCl ₄	298	2.176	24.4	40.2	ИК	[31]
PhS(O)Ph	CCl ₄	298	1.657	21.0	38.7	ИК	[33]
Me ₂ NS(O)Me	CCl ₄	298	2.041	22.8	37.4	ИК	[31]
Me ₂ NS(O)Ph	CCl ₄	298	1.809	21.9	38.9	ИК	[33]
MeNH ₂ SO ₂ Me	CCl ₄	298	1.076	13.7	25.3	ИК	[34]
Me ₂ NSO ₂ Me	CCl ₄	298	1.095	17.7	38.4	ИК	[21]
(Me ₂ N) ₃ PO	CCl ₄	298	3.135	33.1	51.0	ИК	[36]
Me ₂ NC(S)Me	CCl ₄	298	0.981	15.9	34.6	ИК	[17]
Me ₂ NC(S)NMe ₂	CCl ₄	298	1.097	17.8	38.7	ИК	[17]
	CCl ₄	298	1.104	17.2	36.6	ИК	[17]

<chem>(Me2N)3PO</chem>	<chem>CCl4</chem>	298	3.137	33.1	51.0	ИК	[17]
<chem>(Me2N)3PS</chem>	<chem>CCl4</chem>	298	1.092	16.4	34.1	ИК	[36]
Py	<chem>C6H6</chem>	298	1.041	10.9	16.6	ИК	[49]
	<chem>C6H6</chem>	298	1.265	15.5	27.7	ИК	[49]
	<chem>C6H6</chem>	298	1.228	12.1	17.2	ИК	[49]
	<chem>C6H6</chem>	298	1.236	15.1	26.9	ИК	[49]
	<chem>C6H6</chem>	298	1.757	17.2	24.0	ИК	[49]
	<chem>C6H6</chem>	298	2.792	32.4	55.2	К	[41]
	<chem>C2H4Cl2</chem>	298	0.728	20.2	53.8	ИК	[24]
MeCN	<chem>C2Cl4</chem>	298	0.567	22.0	62.8	ИК	[51]
t-BuCN	<chem>C2Cl4</chem>	298	0.675	20.9	57.3	ИК	[51]
PhCN	<chem>C2Cl4</chem>	298	0.508	20.5	59.4	ИК	[51]
<chem>Cl3CCN</chem>	<chem>C2Cl4</chem>	298	-0.319	12.4	47.7	ИК	[51]
$4-(\text{MeC(O)})-\text{C}_6\text{H}_4\text{OH}$							
<chem>Me2NC(O)NMe2</chem>	<chem>CCl4</chem>	298	2.836	29.3	43.9	ИК	[17]
	<chem>CCl4</chem>	298	3.105	24.7	23.4	ИК	[17]
	<chem>CCl4</chem>	298	1.325	16.3	29.3	ИК	[17]



CCl_4 298 1.636 20.6 37.7 ИК [17]

MeS(O)Me

CCl_4 298 3.013 26.6 31.5 ИК [31]

PhS(O)Ph

CCl_4 298 2.446 25.1 37.4 ИК [33]

$\text{Me}_2\text{NS(O)Me}$

CCl_4 298 2.734 26.7 37.2 ИК [31]

$\text{Me}_2\text{NS(O)Ph}$

CCl_4 298 2.504 25.8 38.6 ИК [33]

MeNHSO_2Me

CCl_4 298 1.545 19.2 34.9 ИК [34]

$\text{Me}_2\text{NSO}_2\text{Me}$

CCl_4 298 1.534 18.0 31.0 ИК [17]

$(\text{Me}_2\text{N})_3\text{PO}$

CCl_4 298 4.418 36.7 38.5 ИК [36]

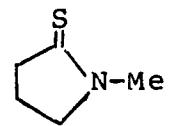
CCl_4 298 4.410 36.7 38.5 ИК [17]

$\text{Me}_2\text{NC(S)Me}$

CCl_4 298 1.592 18.3 30.9 ИК [17]

$\text{Me}_2\text{NC(S)NMMe}_2$

CCl_4 298 1.611 20.7 38.6 ИК [17]



CCl_4 298 1.708 18.7 29.9 ИК [17]

$(\text{Me}_2\text{N})_3\text{PS}$

CCl_4 298 1.700 17.7 26.8 ИК [36]

4-CN-C₆H₄OH

MeS(O)Me

CCl_4 298 3.300 28.3 31.9 ИК [31]

PhS(O)Ph

CCl_4 298 2.840 27.3 37.2 ИК [33]

$\text{Me}_2\text{NS(O)Me}$

CCl_4 298 3.100 27.4 32.5 ИК [31]

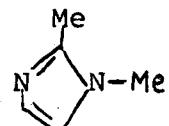
$\text{Me}_2\text{NS(O)Ph}$

CCl_4 298 2.898 27.5 36.8 ИК [33]

MeNHSO_2Me

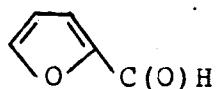
CCl_4 298 1.826 19.4 30.2 ИК [34]

C_6H_6 298 3.146 35.0 57.2 ИК [41]

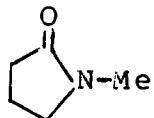


MeCN	C ₂ Cl ₄	298	1.480	25.4	56.9	ИК	[51]
t-BuCN	C ₂ Cl ₄	298	1.590	24.6	52.7	ИК	[51]
PhCN	C ₂ Cl ₄	298	1.350	23.7	53.6	ИК	[51]
Cl ₃ CCN	C ₂ Cl ₄	298	0.167	14.6	45.6	ИК	[51]

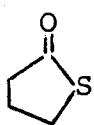
4-NO₂-C₆H₄OH



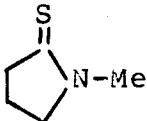
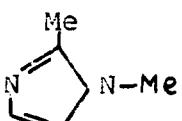
MeC(O)NMe ₂	CCl ₄	298	1.551	26.8	60.2	ИК	[11]
Me ₂ NC(O)NMe ₂	C ₆ H ₆	298	2.450	33.9	66.8	К	[23]
	CCl ₄	298	3.483	32.5	42.4	ИК	[17]
	C ₆ H ₆	298	2.490	32.8	62.4	К	[23]
	CCl ₄	298	3.553	28.9	28.9	ИК	[17]



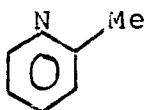
MeS(O)Me	CCl ₄	298	1.856	21.3	35.9	ИК	[17]
----------	------------------	-----	-------	------	------	----	--------



Me ₂ NS(O)Me	CCl ₄	298	3.260	28.5	33.2	ИК	[31]
Me ₂ NS(O)Ph	CCl ₄	298	3.068	28.3	36.2	ИК	[33]
MeNHSO ₂ Me	CCl ₄	298	1.911	19.9	30.1	ИК	[34]
Me ₂ NSO ₂ Me	CCl ₄	298	1.987	21.0	32.4	ИК	[21]
(Me ₂ N) ₃ PO	CCl ₄	298	5.064	38.7	32.9	ИК	[17]
Me ₂ NC(S)Me	CCl ₄	298	1.929	22.6	38.9	ИК	[17]

<chem>Me2NC(S)NMe2</chem>	<chem>CCl4</chem>	298	2.030	20.8	30.9	ИК	[17]
	<chem>CCl4</chem>	298	2.064	21.8	33.6	ИК	[17]
<chem>(Me2N)3PS</chem>	<chem>CCl4</chem>	298	2.025	23.1	38.7	ИК	[36]
<chem>BuNH2</chem>	<chem>C6H12</chem>	298	3.260	38.5	66.9	УФ, К	[57]
	<chem>C6H6</chem>	298	2.820	38.7	76.1	УФ, К	[57]
<chem>Bu2NH</chem>	<chem>C6H12</chem>	298	3.310	41.7	76.1	УФ, К	[57]
	<chem>C6H6</chem>	298	2.630	41.1	87.4	УФ, К	[57]
<chem>Et3N</chem>	<chem>C6H12</chem>	298	3.050	42.7	84.5	УФ, К	[57]
	<chem>C6H6</chem>	298	2.440	38.2	81.6	УФ, К	[57]
	<chem>C6H5Cl</chem>	298	2.860	39.1	76.1	УФ, К	[57]
	<chem>C6H4Cl2</chem>	298	3.010	41.9	82.8	УФ, К	[57]
<chem>Pr3N</chem>	<chem>C6H12</chem>	298	2.510	46.0	106	УФ, К	[57]
	<chem>C6H6</chem>	298	1.790	43.4	111	УФ, К	[57]
<chem>Bu3N</chem>	<chem>C6H12</chem>	298	2.630	43.5	95.4	УФ, К	[57]
	<chem>C6H6</chem>	298	1.860	35.0	82.0	УФ, К	[57]
	<chem>C6H5Cl</chem>	298	2.420	36.9	77.4	УФ, К	[57]
	<chem>C6H4Cl2</chem>	298	2.560	42.2	92.9	УФ, К	[57]
<chem>PhCH2NH2</chem>	<chem>C6H6</chem>	298	2.380	35.3	72.4	УФ, К	[57]
	<chem>C6H5Cl</chem>	298	2.540	34.5	66.9	УФ, К	[57]
	<chem>C6H4Cl2</chem>	298	2.520	34.0	65.7	УФ, К	[57]
<chem>PhC(O)(CH2)2NMe2</chem>	<chem>C6H6</chem>	298	2.160	38.5	87.9	К	[23]
<chem>PhC(O)CH=CHNMe2</chem>	<chem>C6H6</chem>	298	2.360	28.7	51.3	К	[23]
	<chem>C6H6</chem>	298	3.041	36.7	64.9	К	[41]
<chem>Py</chem>	<chem>C6H12</chem>	298	3.070	34.3	56.1	УФ, К	[57]
	<chem>CCl4</chem>	298	2.880	37.2	69.0	ИК	[48]

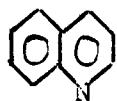
	CCl_4	298	2.602	30.1	51.2	ИК	[15]
	C_6H_6	298	2.070	28.8	57.3	УФ, ИК	[57]
	C_6H_6	298	2.009	21.3	32.9	ИК	[49]
	$\text{C}_6\text{H}_5\text{Cl}$	298	2.400	30.6	56.9	УФ, ИК	[57]
	$\text{C}_2\text{H}_4\text{Cl}_2$	298	2.050	27.6	52.7	ИК	[48]
	$\text{C}_6\text{H}_4\text{Cl}_2$	298	2.590	31.3	55.6	УФ, ИК	[57]
	C_6H_6	298	2.127	25.1	43.5	ИК	[49]



	C_6H_6	298	2.114	22.6	35.3	ИК	[49]
	C_6H_6	298	2.193	24.3	39.5	ИК	[49]

MeCN	CCl_4	303	1.060	31.0	82.0	УФ	[58]
	CCl_4	298	1.151	31.0	82.0	**	
	C_2Cl_4	298	1.520	29.2	68.6	ИК	[51]
EtCN	CCl_4	303	1.180	17.2	34.0	УФ	[58]
	CCl_4	298	1.239	17.2	34.0	**	
Me ₂ CHCH ₂ CN	CCl_4	303	1.230	31.0	78.6	УФ	[58]
	CCl_4	298	1.329	31.0	78.6	**	
t-BuCN	C_2Cl_4	298	1.680	28.2	62.3	ИК	[51]
PhCH ₂ CN	CCl_4	303	1.360	28.9	69.0	УФ	[58]
	CCl_4	298	1.462	28.9	69.0	**	
CH ₂ =CHCN	CCl_4	303	0.886	11.4	20.7	УФ	[58]
	CCl_4	298	0.917	11.4	20.7	**	
ClCH ₂ CH ₂ CN	CCl_4	303	1.010	28.2	74.0	УФ	[58]
	CCl_4	298	1.078	28.2	74.0	**	
Cl ₃ CCN	C_2Cl_4	298	0.079	18.2	59.4	ИК	[51]
PhCN	C_2Cl_4	298	1.440	27.4	64.4	ИК	[51]

2-Ph-C₆H₄OH



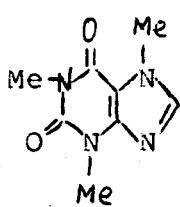
CCl ₄	298	0.790	27.8	78.1	K	[59]
CS ₂	298	1.020	31.4	85.9	K	[59]

2,3-Me₂-C₆H₃OH



C ₆ H ₁₂	298	0.778	34.4	101	УФ	[60]
--------------------------------	-----	-------	------	-----	----	------

2,4-Me₂-C₆H₃OH



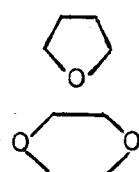
C ₂ H ₄ Cl ₂	298	0.881	15.6	35.5	ИК	[25]
---	-----	-------	------	------	----	------

2,5-Me₂-C₆H₃OH



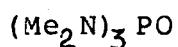
C ₆ H ₁₂	298	0.778	26.1	72.7	УФ	[60]
--------------------------------	-----	-------	------	------	----	------

2,6-Me₂-C₆H₃OH



CCl ₄	298	0.431	17.9	51.7	K	[10]
------------------	-----	-------	------	------	---	------

C ₆ H ₁₂	298	0.982	11.7	20.5	УФ	[60]
--------------------------------	-----	-------	------	------	----	------



CCl ₄	298	2.100	20.1	27.2	ИК	[29]
------------------	-----	-------	------	------	----	------



C ₈ H ₁₈	298	0.826	22.6	60.0	K	[56]
--------------------------------	-----	-------	------	------	---	------



C ₆ H ₆	298	0.301	35.1	112	K	[56]
-------------------------------	-----	-------	------	-----	---	------

C ₇ H ₁₆	298	1.350	27.2	65.4	ИК	[42]
--------------------------------	-----	-------	------	------	----	------

C ₈ H ₁₈	298	1.072	27.6	72.0	K	[56]
--------------------------------	-----	-------	------	------	---	------

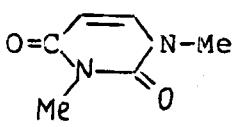
CCl ₄	298	0.809	18.4	46.9	ИК	[48]
------------------	-----	-------	------	------	----	------

C ₆ H ₆	298	0.724	20.5	54.9	K	[56]
-------------------------------	-----	-------	------	------	---	------

C ₂ H ₄ Cl ₂	298	0.631	14.6	37.2	ИК	[48]
---	-----	-------	------	------	----	------

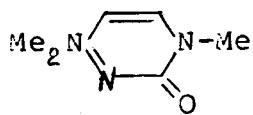
2-Me-6-(t-Bu)-C₆H₃OH

MeNO ₂	C ₆ H ₁₂	298	0.146	14.6	46.3	ЯМР	[61]
(MeO) ₂ P(O)Me	C ₆ H ₁₂	298	1.821	23.0	42.3	ЯМР	[62]
	CCl ₄	298	1.176	16.7	33.5	ЯМР	[62]
	CHCl ₃	298	-0.086	11.7	40.9	ЯМР	[62]
(EtO) ₂ P(O)CCl ₃	C ₆ H ₁₂	298	1.107	17.6	37.8	ЯМР	[62]
	CCl ₄	298	0.279	12.5	36.6	ЯМР	[62]
	CHCl ₃	298	-0.585	10.0	44.7	ЯМР	[62]
(EtO) ₃ PO	C ₆ H ₁₂	298	1.751	22.2	41.0	ЯМР	[62]
	CCl ₄	298	1.134	16.7	34.3	ЯМР	[62]
	CHCl ₃	298	-0.161	11.3	41.0	ЯМР	[62]
(Me ₂ N) ₃ PO	C ₆ H ₁₂	298	2.732	30.1	48.7	ЯМР	[61]
	CCl ₄	298	1.699	21.3	39.0	ЯМР	[61]
	CCl ₄	298	1.701	21.3	38.9	ЯМР	[62]
	C ₆ H ₆	298	1.763	18.0	26.6	ЯМР	[61]
	CHCl ₃	298	0.140	10.5	32.5	ЯМР	[62]
	CH ₃ CN	298	0.255	10.9	31.6	ЯМР	[61]
	MeNO ₂	298	0.771	15.9	38.6	ЯМР	[61]
CH ₃ CN	C ₆ H ₁₂	298	0.255	18.4	56.9	ЯМР	[61]
	CCl ₄	298	-0.092	10.9	38.2	ЯМР	[61]
CHCl ₃	C ₆ H ₁₂	298	-0.509	5.3	27.5	ЯМР	[62]
<u>3,4-Me₂-C₆H₃OH</u>							
	C ₂ H ₄ Cl ₂	298	1.117	23.7	58.1	ИК	[24]
	C ₂ H ₄ Cl ₂	298	1.069	22.8	56.0	ИК	[24]



CCl₄ 298 1.519 22.7 47.2 ИК [24]

$C_2H_4Cl_2$ 298 0.919 21.1 53.1 ИК [24]

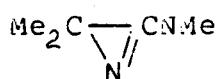


$C_2H_4Cl_2$ 298 1.747 28.1 60.8 ИК [24]



C_8H_{18} 298 1.653 30.1 69.3 К [56]

C_6H_6 298 1.204 36.8 100 К [56]



CCl_4 300 2.020 29.7 60.3 ИК [40]

CCl_4 298 2.057 29.7 60.3 **



C_7H_{16} 298 1.514 30.5 73.4 ИК [42]

C_8H_{18} 298 1.568 30.1 70.9 К [56]

CCl_4 298 1.310 23.0 47.7 ИК [48]

C_6H_6 298 1.146 24.7 60.9 К [56]

$C_2H_4Cl_2$ 298 1.100 21.3 50.6 ИК [48]

$C_2H_4Cl_2$ 298 0.697 19.9 53.4 ИК [24]



3,5-Me₂-C₆H₃OH

C_6H_{12} 298 1.183 37.0 101 УФ [60]

2,6-(i-Pr)₂-C₆H₃OH

$(Me_2N)_3PO$ CCl_4 298 1.950 20.3 30.8 ИК [29]

2,6-(t-Bu)₂-C₆H₃OH

$(Me_2N)_3PO$ C_6H_{12} 298 1.580 29.3 68.0 ЯМР [61]

CCl_4 298 0.740 12.8 28.8 ИК [29]

CCl_4 298 0.477 13.0 34.4 ЯМР [61]

C_6H_6 298 0.756 20.1 52.9 ЯМР [61]

CH_3CN 298 -0.319 12.1 46.8 ЯМР [61]

2,3-Cl₂-C₆H₃OH

Py	C ₇ H ₁₆	298	1.550	28.0	64.4	ИК	[42]
----	--------------------------------	-----	-------	------	------	----	------

2,4-Cl₂-C₆H₃OH

Py	C ₇ H ₁₆	298	1.470	27.6	64.4	ИК	[42]
----	--------------------------------	-----	-------	------	------	----	------

Py	CCl ₄	298	1.270	23.0	51.9	ИК	[48]
----	------------------	-----	-------	------	------	----	------

C ₂ H ₄ Cl ₂	298	1.050	22.2	54.4	ИК	[48]
---	-----	-------	------	------	----	------

2,5-Cl₂-C₆H₃OH

Py	C ₇ H ₁₆	298	1.700	25.5	53.0	ИК	[42]
----	--------------------------------	-----	-------	------	------	----	------

CCl ₄	298	1.500	23.4	49.8	ИК	[48]
------------------	-----	-------	------	------	----	------

C ₂ H ₄ Cl ₂	298	1.330	22.6	50.2	ИК	[48]
---	-----	-------	------	------	----	------

2,6-Cl₂-C₆H₃OH

Py	C ₇ H ₁₆	298	1.310	26.8	64.7	ИК	[42]
----	--------------------------------	-----	-------	------	------	----	------

CCl ₄	298	1.140	24.3	58.6	ИК	[48]
------------------	-----	-------	------	------	----	------

C ₂ H ₄ Cl ₂	298	0.860	21.8	56.5	ИК	[48]
---	-----	-------	------	------	----	------

3,4-Cl₂-C₆H₃OH

CCl ₄	293	2.024	22.9	39.4	ИК	[20]
------------------	-----	-------	------	------	----	------

CCl ₄	298	1.957	22.9	39.4	**	
------------------	-----	-------	------	------	----	--

CCl ₄	295	2.880	29.4	44.4	ИК	[19]
------------------	-----	-------	------	------	----	------

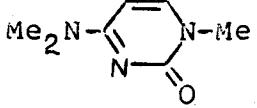
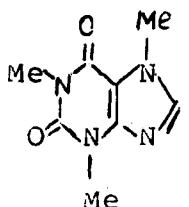
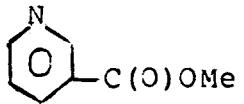
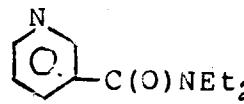
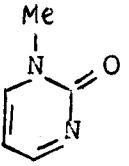
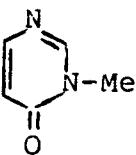
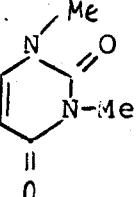
CCl ₄	298	2.835	29.4	44.4	**	
------------------	-----	-------	------	------	----	--

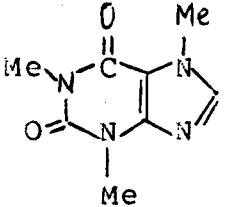
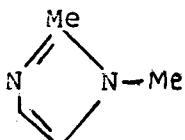
Me	C ₂ H ₄ Cl ₂	298	1.885	30.2	65.2	ИК	[24]
----	---	-----	-------	------	------	----	------

O=C N-Me	C ₂ H ₄ Cl ₂	298	1.650	26.5	57.3	ИК	[24]
------------------	---	-----	-------	------	------	----	------

O=C N-Me	CCl ₄	298	2.257	27.7	49.7	ИК	[24]
------------------	------------------	-----	-------	------	------	----	------

C ₂ H ₄ Cl ₂	298	1.465	25.3	56.8	ИК	[24]
---	-----	-------	------	------	----	------

	$C_2H_4Cl_2$	298	2.986	42.3	84.7	ИК	[24]
	$C_2H_4Cl_2$	298	1.401	19.2	37.6	ИК	[25]
	CCl_4	300	3.110	34.7	56.0	ИК	[40]
	CCl_4	298	3.158	34.7	56.0	**	
Py	C_7H_{16}	298	2.710	41.0	85.5	ИК	[42]
	CCl_4	298	2.360	31.0	59.0	ИК	[48]
	$C_2H_4Cl_2$	298	1.750	23.8	46.4	ИК	[48]
	$C_2H_4Cl_2$	298	1.189	24.2	58.4	ИК	[24]
<u>3,5-Cl₂-C₆H₃OH</u>							
	CCl_4	293	2.142	23.9	40.6	ИК	[20]
	CCl_4	298	2.069	23.9	40.6	**	
	CCl_4	295	2.980	31.5	49.8	ИК	[19]
	CCl_4	298	2.921	31.5	49.8	**	
PhC(O)(CH ₂) ₂ NMe ₂	C_6H_6	298	1.980	34.5	77.8	K	[23]
PhC(O)CH=CHNMe ₂	C_6H_6	298	2.210	26.1	45.3	K	[23]
	$C_2H_4Cl_2$	298	2.070	31.7	66.7	ИК	[24]
	$C_2H_4Cl_2$	298	1.774	27.3	57.6	ИК	[24]
	CCl_4	298	2.423	28.8	50.2	ИК	[24]
	$C_2H_4Cl_2$	298	1.591	26.2	57.6	ИК	[24]

	$C_2H_4Cl_2$	298	1.521	20.0	37.9	ИК	[25]
$Me_2NCH=NPh$	C_6H_{12}	298	2.770	42.0	87.8	К, ИК	[39]
$Me_2NCH=N-\text{C}_6\text{H}_4-\text{Me}$	C_6H_{12}	298	2.910	43.0	88.5	К, ИК	[39]
$Me_2C\begin{array}{c} \diagup \\ \diagdown \end{array} CNMe_2$	CCl_4	300	3.350	35.5	54.0	ИК	[40]
	CCl_4	298	3.402	35.5	54.0	**	
Py	C_7H_{16}	298	2.860	43.5	91.2	ИК	[42]
	C_6H_6	298	2.763	34.8	63.8	К	[41]
	$C_2H_4Cl_2$	298	1.307	25.2	59.5	ИК	[24]

2,4-(NO₂)₂-C₆H₃OH

	C_6H_{12}	293	-0.602	12.4	53.8	УФ	[63]
	C_6H_{12}	298	-0.639	12.4	53.8	**	
$HC(O)NMe_2$	CCl_4	297	-0.770	6.30	36.0	УФ	[64]
	CCl_4	298	-0.776	6.30	36.0	**	
	C_6H_6	299	-0.721	11.0	50.6	УФ	[64]
	C_6H_6	298	-0.715	11.0	50.6	**	
$MeC(O)NMe$	CCl_4	297	0.623	27.0	79.0	УФ	[64]
	CCl_4	298	0.606	27.0	79.0	**	
	C_6H_6	292	0.944	30.7	87.0	УФ	[64]
	C_6H_6	298	0.837	30.7	87.0	**	
$MeC(O)NMe_2$	CCl_4	312	-0.979	3.80	30.9	УФ	[64]
	CCl_4	298	-0.948	3.80	30.9	**	
	C_6H_6	313	-0.955	5.00	34.2	УФ	[64]

C₆H₆ 298 -0.910 5.00 34.2 **

MeS(O)Me C₆H₆ 297 -0.523 2.80 19.4 yΦ [64]

C₆H₆ 298 -0.524 2.80 19.4 **

Et₃N C₆H₁₂ 299 2.660 39.9 82.6 yΦ [64]

C₆H₁₂ 298 2.680 39.9 82.6 **

C₆H₆ 297 3.780 42.4 70.4 yΦ [64]

C₆H₆ 298 3.756 42.4 70.4 **



CCl₄ 306 2.620 41.0 84.1 yΦ [64]

CCl₄ 298 2.795 41.0 84.1 **

C₆H₆ 306 3.420 47.6 90.2 yΦ [64]

C₆H₆ 298 3.633 47.6 90.2 **



CCl₄ 307 2.680 41.8 85.0 yΦ [64]

CCl₄ 298 2.888 41.8 85.0 **

C₆H₆ 306 2.810 45.3 94.4 yΦ [64]

C₆H₆ 298 3.010 45.3 94.4 **



CCl₄ 304 2.120 27.8 51.1 yΦ [64]

CCl₄ 298 2.204 27.8 51.1 **

C₆H₆ 304 2.390 28.3 47.4 yΦ [64]

C₆H₆ 298 2.486 28.3 47.4 **



2,5-(NO₂)₂-C₆H₃OH

C₆H₁₂ 296 0.000 6.1 20.5 yΦ [63]

C₆H₁₂ 298 -0.008 6.1 20.5 **



2,6-(NO₂)₂-C₆H₃OH

C₆H₁₂ 293 0.114 6.1 18.6 yΦ [63]

C₆H₁₂ 298 0.095 6.1 18.6 **

MeC(O)NMe_2	CCl_4	298	2.316	31.4	60.7	ИК	[65]
MeS(O)Me	CCl_4	298	2.400	27.1	44.8	ИК	[66]
$\text{Me}_2\text{NS(O)Me}$	CCl_4	298	2.240	25.4	42.3	ИК	[66]
PhS(O)Ph	CCl_4	298	1.890	23.1	41.4	ИК	[66]
$\text{Me}_2\text{NS(O)Ph}$	CCl_4	298	1.980	23.5	41.0	ИК	[66]
$\text{Me}_2\text{NSO}_2\text{Me}$	CCl_4	298	1.200	17.2	34.7	ИК	[66]
Ph_2SO_2	CCl_4	298	1.110	16.0	32.3	ИК	[66]
$\text{Me}_2\text{NSO}_2\text{Ph}$	CCl_4	298	1.110	16.4	33.7	ИК	[66]
Ph_3PO	CCl_4	298	2.965	30.0	43.8	ИК	[26]
$(\text{MeO})_3\text{PO}$	CCl_4	298	2.324	25.8	42.1	ИК	[27]
$(\text{PhO})_3\text{PO}$	CCl_4	298	1.718	22.1	41.2	ИК	[27]
$(\text{Me}_2\text{N})_3\text{PO}$	CCl_4	298	3.500	32.8	43.1	ИК	[29]
Ph_3PS	CCl_4	298	0.867	13.5	28.7	ИК	[26]
Ph_3PSe	CCl_4	298	0.794	13.4	29.7	ИК	[26]

2-Нафтол

Ph_3PO	CCl_4	298	3.061	32.2	49.4	ИК	[26]
$(\text{MeO})_3\text{PO}$	CCl_4	298	2.346	25.2	39.6	ИК	[27]
$(\text{PhO})_3\text{PO}$	CCl_4	298	1.758	22.4	41.4	ИК	[27]
Ph_3PS	CCl_4	298	0.895	14.1	30.2	ИК	[26]
Ph_3PSe	CCl_4	298	0.796	13.1	28.7	ИК	[26]

2,6-(t-Bu)₂-4-Me-C₆H₂OH

MeC(O)Me	C_6H_{12}	293	-0.456	10.0	43.9	ЯМР	[67]
	C_6H_{12}	298	-0.540	10.0	43.9	**	

2,4,6-(t-Bu)₃-C₆H₂OH

MeC(O)NMe_2	CCl_4	298	-0.076	12.6	43.5	ИК	[65]
Py	C_6H_{12}	307	-0.187	16.9	58.6	ЯМР	[68]

C₆H₁₂ 298 -0.099 16.9 58.6 **

2,6-(1-Ad)₂-4-t-Bu-C₆H₂OH

Py	C ₆ H ₁₂	313	-0.337	14.2	52.7	ЯМР	[68]
	C ₆ H ₁₂	298	-0.264	14.2	52.7	**	

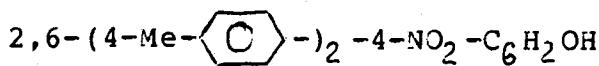
2,6-Me₂-4-Br-C₆H₂OH

Me-CHCl Me	C ₆ H ₁₂	313	0.381	15.9	43.5	ЯМР	[69]
	C ₆ H ₁₂	298	0.515	15.9	43.5	**	
t-BuCl	C ₆ H ₁₂	313	0.448	18.4	50.2	ЯМР	[69]
	C ₆ H ₁₂	298	0.603	18.4	50.2	**	
CH ₂ ClCH ₂ Cl	C ₆ H ₁₂	313	0.317	14.2	39.3	ЯМР	[69]
	C ₆ H ₁₂	298	0.436	14.2	39.3	**	
CH ₂ Cl ₂	C ₆ H ₁₂	313	0.136	11.3	33.5	ЯМР	[69]
	C ₆ H ₁₂	298	0.231	11.3	33.5	**	
CHCl ₃	C ₆ H ₁₂	313	-0.128	12.6	42.7	ЯМР	[69]
	C ₆ H ₁₂	298	-0.022	12.6	42.7	**	

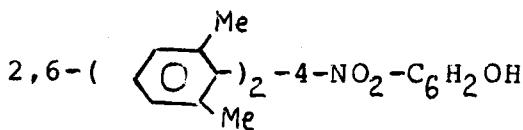
2,6-Ph₂-4-NO₂-C₆H₂OH

	CCl ₄	327	0.381	21.3	57.9	ИК	[70]
	CCl ₄	298	0.707	21.3	57.9	**	
	CCl ₄	327	0.261	18.3	51.0	ИК	[70]
	CCl ₄	298	0.540	18.3	51.0	**	
	CCl ₄	327	0.381	19.9	53.7	ИК	[70]
	CCl ₄	298	0.685	19.9	53.7	**	
Me ₂ SO	CCl ₄	327	1.338	25.0	51.0	ИК	[70]
	CCl ₄	298	1.721	25.0	51.0	**	
PhCN	CCl ₄	327	0.080	17.2	51.1	ИК	[70]

CCl_4 298 0.342 17.2 51.1 **



	CCl_4	327	0.241	18.7	52.6	ИК	[70]
	CCl_4	298	0.527	18.7	52.6	**	
	CCl_4	327	0.147	13.3	37.8	ИК	[70]
	CCl_4	298	0.350	13.3	37.8	**	
	CCl_4	327	0.227	13.0	35.5	ИК	[70]
	CCl_4	298	0.428	13.0	35.5	**	
Me_2SO	CCl_4	327	1.024	20.0	41.8	ИК	[70]
	CCl_4	298	1.330	20.0	41.8	**	
PhCN	CCl_4	327	0.060	12.7	37.8	ИК	[70]
	CCl_4	298	0.255	12.7	37.8	**	



	CCl_4	327	0.401	16.0	41.4	ИК	[70]
	CCl_4	298	0.646	16.0	41.4	**	
	CCl_4	327	0.281	14.9	40.1	ИК	[70]
	CCl_4	298	0.508	14.9	40.1	**	
	CCl_4	327	0.475	16.2	40.5	ИК	[70]
	CCl_4	298	0.722	16.2	40.5	**	
Me_2SO	CCl_4	327	1.338	22.2	42.3	ИК	[70]
	CCl_4	298	1.677	22.2	42.3	**	
PhCN	CCl_4	327	0.093	16.7	49.3	ИК	[70]

CCl_4 298 0.356 16.7 49.3 **

2,6-(4-t-Bu-C₆H₄)₂-4-NO₂-C₆H₂OH

	CCl_4	327	0.214	17.8	50.4	ИК	[70]
	CCl_4	298	0.487	17.8	50.4	**	
	CCl_4	327	0.087	12.3	35.9	ИК	[70]
	CCl_4	298	0.274	12.3	35.9	**	
	CCl_4	327	0.161	11.9	33.3	ИК	[70]
	CCl_4	298	0.341	11.9	33.3	**	
Me ₂ SO	CCl_4	327	0.970	19.6	41.5	ИК	[70]
PhCN	CCl_4	298	1.270	19.6	41.5	**	
	CCl_4	327	-0.040	11.1	34.7	ИК	[70]
	CCl_4	298	0.130	11.1	34.7	**	

2,6-(2-Me-C₆H₄)₂-4-NO₂-C₆H₂OH

	CCl_4	327	0.414	19.8	52.6	ИК	[70]
	CCl_4	298	0.717	19.8	52.6	**	
	CCl_4	327	0.328	17.8	58.2	ИК	[70]
	CCl_4	298	0.600	17.8	58.2	**	
	CCl_4	327	0.462	18.1	46.6	ИК	[70]
	CCl_4	298	0.532	18.1	46.6	**	
Me ₂ SO	CCl_4	327	1.405	23.1	43.6	ИК	[70]
PhCN	CCl_4	298	1.758	23.1	43.6	**	
	CCl_4	327	0.127	17.0	49.7	ИК	[70]
	CCl_4	298	0.387	17.0	49.7	**	

2,3,4-Cl₃-C₆H₂OH

Py C₇H₁₆ 298 1.850 31.0 68.4 ИК [42]

2,3,6-Cl₃-C₆H₂OH

Py	C ₇ H ₁₆	298	1.580	29.3	68.1	ИК	[42]
	CCl ₄	298	1.460	25.1	56.1	ИК	[48]
	C ₂ H ₄ Cl ₂	298	1.160	22.6	53.6	ИК	[48]

2,4,5-Cl₃-C₆H₂OH

Py	C ₇ H ₁₆	298	1.806	31.0	69.4	ИК	[42]
	CCl ₄	298	1.710	23.8	47.7	ИК	[48]
	C ₂ H ₄ Cl ₂	298	1.510	23.4	49.8	ИК	[48]

2,4,6-Cl₃-C₆H₂OH

Py	C ₇ H ₁₆	298	1.459	29.3	70.4	ИК	[42]
	CCl ₄	298	1.460	24.3	53.1	ИК	[48]
	C ₂ H ₄ Cl ₂	298	1.070	22.2	54.0	ИК	[48]

3,4,5-Cl₃-C₆H₂OH

	CCl ₄	293	2.301	25.1	41.6	ИК	[20]
	CCl ₄	298	2.228	25.1	41.6	**	

	CCl ₄	295	3.290	33.8	51.5	ИК	[19]
	CCl ₄	298	3.236	33.8	51.5	**	

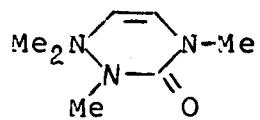
PhC(O)(CH ₂) ₂ NMe ₂	C ₆ H ₆	298	2.090	36.8	83.6	К	[23]
PhC(O)CH=CHNMe ₂	C ₆ H ₆	298	2.210	27.8	51.0	К	[23]

	C ₂ H ₄ Cl ₂	298	2.261	33.3	68.4	ИК	[24]

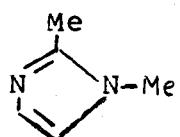
	C ₂ H ₄ Cl ₂	298	1.911	28.2	58.0	ИК	[24]

	CCl ₄	298	2.560	30.0	50.9	ИК	[20]

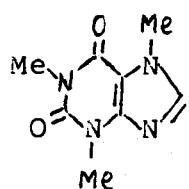
$C_2H_4Cl_2$ 298 1.710 27.2 58.5 ИК [24]



$C_2H_4Cl_2$ 298 3.568 48.6 94.7 ИК [24]



C_6H_6 298 2.934 35.7 63.3 К [41]



$C_2H_4Cl_2$ 298 1.732 21.0 37.3 ИК [25]

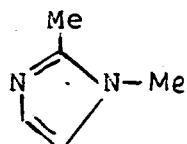


$C_2H_4Cl_2$ 298 1.394 26.3 60.8 ИК [24]

2,6-Cl₂-4-NO₂-C₆H₂OH

BuOBu C_6H_{12} 298 0.633 28.7 84.1 К [18]

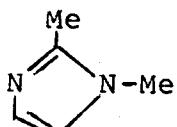
MeC(O)NET₂ C_6H_{12} 298 1.996 31.1 66.1 К [18]



C_6H_6 298 3.531 55.3 118 К [41]

2,4,6-(NO₂)₃-C₆H₂OH

Oct₃PO C_6H_{12} 298 3.146 59.4 139 К [18]



C_6H_6 298 3.332 84.9 221 К [41]

2,3,4,6-Cl₄-C₆H OH

Py C_7H_{16} 298 1.951 31.4 68.1 ИК [42]

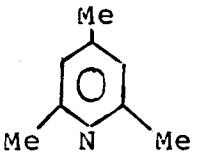
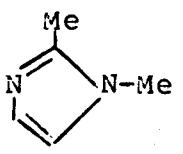
CCl_4 298 1.680 26.4 56.5 ИК [48]

$C_2H_4Cl_2$ 298 1.350 23.4 52.7 ИК [48]

2,3,4,5,6-E₅-C₆OH

H ₂ O	CH ₂ Cl ₂	298	0.415	27.6	84.6	ИК	[72]
	CCl ₄	298	2.057	27.7	53.4	К	[10]
(Me ₂ N) ₃ PO	CCl ₄	298	4.430	35.0	32.6	ИК	[29]

2,3,4,5,6-Cl₅-C₆OH

	CCl ₄	298	1.025	21.6	52.8	К	[10]
(CD ₃) ₂ CO	CCl ₄	298	0.700	22.2	61.0	ИК	[32]
(CD ₃) ₂ SO	CCl ₄	298	2.251	31.4	62.2	ИК	[32]
(CD ₃ O) ₂ SO ₂	CCl ₄	298	-0.018	11.3	38.2	ИК	[32]
Oct ₃ PO	C ₆ H ₁₂	298	4.255	41.1	56.4	К	[18]
(Me ₂ N) ₃ PO	CCl ₄	298	3.180	26.5	27.9	ИК	[29]
C ₅ D ₅ N	CCl ₄	298	2.128	39.7	92.6	ИК	[32]
	CCl ₄	298	2.462	57.7	146	ИК	[32]
CD ₃ CN	CCl ₄	298	0.362	17.6	52.0	ИК	[32]
	C ₆ H ₆	298	3.243	40.6	74.1	К	[41]
PY	C ₇ H ₁₆	298	2.104	32.6	69.1	ИК	[42]
	CCl ₄	298	1.820	26.8	54.4	ИК	[48]
	C ₂ H ₄ Cl ₂	298	1.460	23.8	51.9	ИК	[48]

2,3,4,5,6-Br₅-C₆OH

	CCl ₄	298	0.756	19.7	51.6	К	[10]
(Me ₂ N) ₃ PO	CCl ₄	298	2.620	24.7	32.7	ИК	[29]

Принятые в таблице сокращения и условные обозначения:

1. Величины констант равновесий К даны для реакций образования водородной связи $A + B \rightleftharpoons A \dots B$ в л/моль; энталпии Н-связи ΔH в кДж/моль; энтропии Н-связи ΔS в Дж/(моль·К)

2. χ - термодинамические величины, полученные авторами настоящей работы методами ИК-спектрофотометрии и растворной калориметрии

3. $\chi_{\text{ж}}$ - термодинамические величины, пересчитанные авторами настоящей работы на стандартную температуру 298.15 К, см. с. 4,5 обзора

4. Термодинамические данные получены методами:

ИК - инфракрасной спектроскопии,

УФ - ультрафиолетовой спектроскопии,

К - растворной калориметрии,

ЯМР - ядерного магнитного резонанса,

ЭПР - электронного парамагнитного резонанса,

ДР - диэлектрической релаксации

5. Растворители:

$C_2H_4Cl_2$ - I,2 - дихлорэтан

C_2Cl_4 - тетрахлорэтилен

$C_4H_8O_2$ - I,4 - диоксан

C_6H_6 - бензол

C_6H_{12} - ц-гексан

C_6H_{14} - н-гексан

$C_6H_4Cl_2$ - I,2 - дихлорбензол

C_6H_5Cl - хлорбензол

C_7H_8 - толуол

C_7H_{16} - н-гептан

C_8H_{10} - этилбензол

C_8H_{18} - н-октан

6. В списке литературы ссылки [31] и [33] повторены под номерами [54] и [55]

Таблица 2

Значения энталпий водородной связи (кДж/моль) фенолов с наиболее распространенными электронодонорными соединениями в CCl_4 при 298 К.

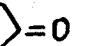
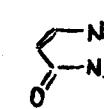
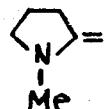
Основание	Заместитель в феноле												I-нафтол
	4-H	4-Me	4-s-Bu	4-F	4-Cl	4-Br	4-I	4-MeO	4-Ac	4-NO ₂	4-CN	I-нафтол	
1. MeOPh	12.1	-	-	9.6	16.3	15.9	-	15.9	-	-	-	-	-
2. MeC(O)NMe ₂	26.8	-	-	-	-	-	-	-	-	29.3	-	31.4	
3. 	25.9	25.9	24.7	-	27.2	26.8	25.9	27.2	24.7	28.9	-	-	
4. 	16.4	15.3	15.9	-	17.6	17.5	18.3	15.6	16.3	21.5	-	-	
5. 	17.0	17.9	17.6	-	18.7	19.7	20.1	17.8	20.6	21.3	-	-	1
6. 	23.9	-	-	24.3	25.5	25.6	-	23.2	-	-	-	-	1
7. (Me ₂ N) ₃ P(O)	33.7	29.9	32.8	32.3	33.5	32.9	35.0	33.1	36.7	38.7	-	32.8	
8. Me ₂ SO	26.5	23.2	23.0	-	25.7	25.9	25.7	24.4	26.7	30.2	28.3	27.1	
9. Me ₂ NS(0)Me	23.3	21.8	21.4	-	25.7	-	25.3	22.8	-	28.5	27.4	25.4	
10. Ph ₂ SO	20.3	20.8	20.9	-	24.4	24.9	24.8	21.0	25.1	27.7	27.3	23.1	
11. Me ₂ NS(0)Ph	20.6	21.2	21.3	-	24.3	25.1	25.4	21.9	25.8	28.3	27.5	23.5	
12. MeNHSO ₂ Me	16.7	14.6	15.7	-	16.5	17.4	-	13.7	19.2	19.9	-	-	
13. Me ₂ NSO ₂ Me	16.9	-	17.7	-	17.9	18.3	17.6	17.7	18.0	21.0	-	17.2	
14. Me ₂ C=C(CNMe ₂) ₂	31.3	30.1	-	-	32.6	-	31.8	-	-	-	-	-	
15. Py	27.0	-	-	-	28.9	28.0	28.0	-	-	37.2	-	-	
16. 	15.8	15.2	17.8	-	18.2	18.6	19.3	17.2	18.7	21.8	-	-	

Таблица 3

Значения энтропий водородной связи (Дж/(моль·К)) фенолов с наиболее распространенными электронодонорными соединениями в CCl_4 при 298 К.

Основание	Заместитель в феноле											I-нафтол
	4-H	4-Me	4-s-Bu	4-F	4-Cl	4-Br	4-I	4-MeO	4-Ac	4- NO_2	4-CN	
1. MeOPh	37.5	-	-	26.3	51.1	49.8	-	48.0	-	-	-	-
2. MeC(0)NMe_2	49.2	-	-	-	-	-	-	-	-	36.8	-	60.7
3.	44.8	47.3	41.4	-	40.2	38.1	35.1	50.6	23.4	28.9	-	-
4.	39.1	37.1	39.2	-	38.3	37.4	33.8	37.9	29.3	40.3	-	-
5.	32.5	37.3	36.0	-	34.9	37.7	38.9	36.6	37.7	35.9	-	-
6.	47.8	-	-	48.0	48.5	48.6	-	48.4	-	-	-	-
7. $(\text{Me}_2\text{N})_3\text{PO}$	50.7	40.0	50.1	38.1	35.2	35.5	41.6	51.0	38.5	32.9	-	43.1
8. Me_2SO	45.8	36.2	35.2	-	34.5	33.9	32.2	40.2	37.2	33.2	31.9	44.8
9. $\text{Me}_2\text{NS(0)Me}$	36.6	34.2	32.5	-	37.6	-	35.6	37.2	-	33.2	32.5	42.3
10. Ph_2SO	33.9	38.3	38.8	-	39.2	40.9	39.8	38.7	37.2	34.5	37.2	41.4
11. $\text{Me}_2\text{NS(0)Ph}$	32.7	37.2	38.7	-	37.6	38.9	39.9	38.9	38.6	36.2	36.9	41.0
12. $\text{MeNH}(\text{SO}_2\text{Me})_2$	34.4	28.1	30.8	-	28.8	31.3	-	25.3	34.9	30.1	-	-
13. $\text{Me}_2\text{NSO}_2\text{Me}$	34.9	-	39.1	-	32.4	33.8	31.1	38.4	31.0	32.4	-	34.7
14. $\text{Me}_2\text{C}=\text{N}-\text{CNMe}_2$	60.7	59.0	-	-	58.3	-	53.0	-	-	-	-	-
15. Py	59.9	-	-	-	59.0	55.2	56.1	-	-	69.0	-	-
16.	30.0	30.3	38.7	-	32.4	33.3	35.6	36.6	29.9	33.6	-	-

Таблица 4

Электроноакцепторные энталпийные (E_i) и энтропийные (Ω_i) факторы фенолов, полученные на основе данных о ΔH и ΔS водородной связи фенолов с органическими электронодонорами в CCl_4 при 298 К. В скобках указано число систем, по которым оценены факторы и их стандартные отклонения от среднего.

Заместитель в феноле	- E_i	- Ω_i
4-H	1.00(принято)	1.00(принято)
2-Me	0.38±0.06(12)	0.72±0.05(10)
2-s-Bu	0.97±0.05(14)	0.88±0.05(12)
2-Cl	0.81±0.02(19)	0.85±0.03(20)
2-MeO	0.51±0.02(31)	0.66±0.03(30)
3-Cl	1.11±0.01(23)	1.00±0.02(23)
3-Me	0.90±0.03(28)	0.81±0.06(31)
3-F	1.12±0.01(13)	0.99±0.04(9)
3-NO ₂	1.25±0.02(32)	1.05±0.02(29)
3-OH	1.05(2)	0.99(2)
3-Br	1.12±0.01(25)	0.99±0.01(18)
4-Me	0.95(Табл.1)	0.99(Табл.2)
4-s-Bu	0.98(Табл.1)	1.04(Табл.2)
4-t-Bu	0.94±0.02(16)	0.90±0.03(16)
4-F	1.02±0.01(40)	0.97±0.01(40)
	0.98(Табл.1)	0.83(Табл.2)
4-Cl	1.07(Табл.1)	0.98(Табл.2)
4-Br	1.07(Табл.1)	0.97(Табл.2)
4-I	1.07(Табл.1)	0.95(Табл.2)
4-MeO	1.00(Табл.1)	1.06(Табл.2)
4-Ac	1.10(Табл.1)	0.91(Табл.2)
Соединение: 1-нафтол	1.08(Табл.1)	1.12(Табл.2)
4-CN	1.20(Табл.1)	0.92(Табл.2)
4-NO ₂	1.23(Табл.1)	0.93(Табл.2)

Продолжение табл. 4

Заместитель в феноле	- E _i	- O _i
3,4-Me ₂	0.94±0.01(39)	0.93±0.02(44)
3,4-Cl ₂	1.18±0.01(43)	1.04±0.01(42)
3,5-Cl ₂	1.16±0.01(49)	1.04±0.01(49)
3,4,5-Cl ₃	1.24±0.01(30)	1.12±0.02(32)
Соединение: 2-нафтол	1.05±0.03(8)	1.08±0.04(8)
2,6-(i-Pr) ₂	0.63±0.01(14)	0.74±0.02(14)
2,6-(t-Bu) ₂	0.40±0.01(28)	0.76±0.02(28)
2,3-Cl ₂	0.31±0.04(5)	0.78±0.06(5)
2,4-Cl ₂	0.85±0.02(12)	0.37±0.04(12)
2-Me,6-t-Bu	0.66±0.01(II)	0.93±0.03(II)
2,6-Me ₂	0.66±0.01(35)	0.70±0.02(32)
2,5-Cl ₂	0.87±0.02(19)	0.85±0.03(19)
2,6-Cl ₂	0.90±0.02(19)	0.95±0.04(20)
2,4-(NO ₂) ₂	1.30±0.07(6)	0.9±0.1(5)
2,4,6-(t-Bu) ₃	0.50±0.03(7)	0.90±0.04(7)
2,6-Ad ₂ ,4-t-Bu	0.49(2)	0.66(2)
2,6-Ph ₂ ,4-NO ₂	1.04±0.01(10)	1.42±0.06(15)
2,6-(4-Me-Ph) ₂ ,4-NO ₂	0.83±0.01(II)	1.17±0.05(15)
2,6-(2,6-Me ₂ Ph) ₂ 4-NO ₂	0.92±0.01(10)	1.19±0.05(14)
2,6-(4-t-Bu-Ph) ₂ 4-NO ₂	0.81±0.01(II)	1.16±0.05(15)
2,6-(2-Me-Ph) ₂ ,4-NO ₂	0.95±0.01(10)	1.18±0.07(15)
2,3,4-Cl ₃	0.90±0.05(5)	0.83±0.06(5)
2,3,6-Cl ₃	0.94±0.02(19)	0.91±0.04(21)
2,4,5-Cl ₃	0.98±0.03(28)	0.89±0.03(29)
2,4,6-Cl ₃	0.95±0.01(14)	0.89±0.03(21)
2,3,4,6-Cl ₄	1.03±0.01(14)	0.91±0.04(21)
2,3,4,5,6-F ₅	1.09±0.01(15)	0.79±0.02(15)
2,3,4,5,6-Cl ₅	0.93±0.02(38)	0.89±0.03(36)
2,3,4,5,6-Br ₅	0.78±0.01(16)	0.80±0.02(16)

Таблица 5

Сравнение экспериментальных [13-15] и рассчитанных с использованием факторов E_j и O_j термодинамических характеристик водородной связи фенолов с органическими основаниями (электронодонорами) в CCl_4 при 298 К.

Система, для которой рассчи- таны величины ΔH , ΔS , lgK	Система, из которой по данным ΔH и ΔS опре- делены факторы E_j и O_j основания	$-\Delta H$		$-\Delta S$		lgK	
		кДж/моль	расч. эксп.	Дж/(моль К)	расч. эксп.	(К в л/моль)	расч. эксп.
1. $C_6Cl_5OH + \text{C}_6H_5O$	$2,3,4,6-Cl_4C_6OH + \text{C}_6H_5O$	24.2	27.2	65.7	71.7	0.808	I.02I
2. $2,4,6-Cl_3C_6H_2OH + \text{C}_6H_5O$	$2-ClC_6H_4OH + \text{C}_6H_5O$	24.5	23.4	69.7	67.2	0.652	0.590
3. $4-MeC_6H_4OH + Ph_2SO_2$	$C_6H_5OH + Ph_2SO_2$	14.9	14.9	32.5	31.4	0.913	0.973
4. $4-MeOC_6H_4OH + Ph_2SO_2$	$C_6H_5OH + Ph_2SO_2$	15.7	14.5	34.8	31.4	0.933	0.902
5. $4-IC_6H_4OH + Ph_2SO_2$	$C_6H_5OH + Ph_2SO_2$	16.8	18.0	31.2	34.9	I.313	I.332
6. $C_6H_5OH + PhSO_2NMe_2$	$4-AcC_6H_4OH + PhSO_2NMe_2$	17.1	15.7	38.4	32.6	0.990	I.049
7. $4-CNC_6H_4OH + PhSO_2NMe_2$	$4-AcC_6H_4OH + PhSO_2NMe_2$	20.5	20.1	35.3	32.2	I.748	I.836
8. $4-NO_2C_6H_4OH + PhSO_2NMe_2$	$4-AcC_6H_4OH + PhSO_2NMe_2$	21.0	21.5	35.7	34.9	I.814	I.938
9. I-нафтол + Ph_3PO	$C_6H_5OH + Ph_3PO$	32.7	30.0	53.9	43.8	2.913	2.965
10. 2-нафтол + Ph_3PO	$C_6H_5OH + Ph_3PO$	31.8	32.2	51.9	49.2	2.860	3.06I