

Задача 1

| | | | | | |
|--|----------------------|------|--|------------------------|------|
| H ₂ O | -6.4 | | CN ⁻ | -75 ± 5 | -77 |
| H ₃ O ⁺ | -105 ± 5 | -104 | acetonitrile | -3.9 | |
| OH ⁻ | -110 ± 5 | -106 | CH ₃ CNH ⁺ | -69 ± 5 | -69 |
| MeOH ₂ ⁺ | -87 ± 5 ^j | -83 | nitromethane | -3.7 ^h | |
| MeO ⁻ | -98 ± 5 | -95 | CH ₂ NO ₂ ⁻ | -80 ± 6 | |
| EtOH ₂ ⁺ | -81 ± 6 ⁱ | | HNO ₂ | | |
| EtO ⁻ | -94 ± 5 | | NO ₂ ⁻ | -73 ± 7 | -72 |
| PhOH | -6.6 | | HNO ₃ | | |
| PhO ^{-d} | -75 ± 5 | -72 | NO ₃ ⁻ | -66 ± 5 | -65 |
| acetaldehyde | -3.5 | | H ₂ S | -0.7 | |
| formic acid | | | HS ⁻ | -76 ± 5 | -76 |
| formate | -80 ± 5 | | MeSH | -1.2 | |
| acetic acid | -6.7 | | MeS ⁻ | -76 ± 5 | |
| acetate | -82 ± 5 | -77 | EtSH | -1.2 | |
| CHF ₂ COOH | | | EtS ⁻ | -74 ± 5 | |
| CHF ₂ COO ⁻ | -70 ± 6 | | PhSH | -2.6 | |
| CHCl ₂ COOH | | | PhS ⁻ | -65 ± 7 ⁱ | -67 |
| CHCl ₂ COO ⁻ | -66 ± 6 | | PH ₃ | 0.6 | |
| NH ₄ ⁺ | -81 ± 5 | -79 | PH ₄ ⁺ | | -73 |
| MeNH ₃ ⁺ | -73 ± 5 | -70 | MePH ₂ | | |
| Me ₂ NH ₂ ⁺ | -66 ± 5 | -63 | MePH ₃ ⁺ | -63 ± 5 | -66 |
| Me ₃ NH ⁺ | -59 ± 5 | -59 | Me ₂ PH | | |
| aniline | -4.9 | | Me ₂ PH ₂ ⁺ | -57 ± 5 | -57 |
| anilineH ^{+m} | -68 ± 6 | -68 | Me ₃ P | | |
| pyridine | -4.7 | | Me ₃ PH ⁺ | -53 ± 5 | -53 |
| pyridineH ^{+m} | -58 ± 5 | -59 | H ₃ PO ₄ | | |
| imidazole | -10.3 ^g | | H ₂ PO ₄ ⁻ | -68 ± 8 ⁱ | |
| imidazoleH ^{+m} | -64 ± 5 | -62 | HPO ₄ ⁽²⁻⁾ | -245 ± 15 ⁱ | |
| formamide | | | PO ₄ ⁽³⁻⁾ | -536 ± 20 ⁱ | |
| formamideH ^{+k} | -78 ± 5 | | CH ₃ F | -0.2 | |
| acetamide | -9.7 | | HF | | |
| acetamideH ^{+k} | -70 ± 5 | | F ⁻ | -107 ± 6 | -107 |
| cytosine | | | CH ₃ Cl | -0.6 | |
| cytosineH ^{+f} | -67 ± 6 | | ClH | | |
| HCN | | | Cl ⁻ | -78 ± 7 | -77 |

Энергии гидратации (эксперимент, ккал/моль)

(1) Отличия от расчета по Борну, возможные причины

(2) Анализ «геометрических» причин, согласование гипотез с независимой экспериментальной информацией

(3) Поиск спектроскопических подтверждений гипотез

(4) Какую информацию можно извлечь из отклонений от Борна?

Задача 1 – Общая схема

