

Методика оценки электроотрицательности атомов и заместителей в молекуле

Коваленко О.А., *аспирант*; Малашенко А.Г., *студент*;
Лопаткин Ю.М., *профессор*; Кондратенко П.А., *профессор*
Сумский государственный университет
Национальный авиационный университет, г. Киев

Для оценки способности отдельного атома смещать к себе электронные пары в физике вводится такая величина как электроотрицательность. Возникла необходимость ввести подобную характеристику для совокупности атомов.

Исходя из предположения, что перераспределение зарядов вызывает появление потенциального барьера при конформационных преобразованиях, а его высота должна зависеть от степени этого перераспределения, в данной работе предложена экспресс-методика оценки электроотрицательности сложного заместителя. Для проверки того, что методика имеет право на существование, квантово-механическим методом MNDO/d были проведены расчёты потенциальных барьеров в молекуле пероксида фтора с различными атомами в качестве заместителей и данные были сопоставлены с уже известными величинами электроотрицательности этих атомов.

Таблица 1 – Электроотрицательность атомов

	F	O	Br	H	Li	Na
В данной работе	16	9	14	8	0,17	0,2
[1]	9,91	8,11	6,13	2,70	0,75	0,65
[2]	20,871	15,085	14,21	14,353	5,983	5,479

Полученные результаты говорят в пользу предлагаемой экспресс-методики оценки характеристики для заместителей молекул, подобной электроотрицательности для элементов.

1. <https://ru.wikipedia.org/wiki/Электроотрицательность>
2. П.О. Кондратенко, *Фотохімічна дія світла* (Київ:ВПЦ "Київський університет: 2005).