



ЭЛЕКТРООТРИЦАТЕЛЬНОСТЬ

Авторы: Э. Г. Раков

ЭЛЕКТРООТРИЦАТЕЛЬНОСТЬ, количественная характеристика способности атомов в химич. соединении смещать в свою сторону электроны. Значение Э. зависит от положения химич. элемента в периодич. системе и увеличивается слева направо в периодах, а также снизу вверх в группах. Наибольшая величина Э. свойственна атомам F, O, Cl, N (в убывающем порядке), наименьшая – Fr и Cs. На значение Э. влияют также степень окисления, тип соединения, координац. число, природа лигандов и др. Разность Э. атомов в молекуле определяет характер химич. связей: для чисто ковалентной Э. равна нулю, для полярной ковалентной – 0,4–2,0, для ионной – более 2,0.

Э. нельзя определить непосредственно, но можно выразить с помощью эмпирич. соотношений. Первая количественная шкала Э. на основе термохимич. данных об энергии диссоциации двухатомных молекул предложена Л. *Полингом* (1932). Разница величин Э. атомов *A* и *B* выражена уравнением: $\chi_A - \chi_B = (\Delta V)^{-1/2} \sqrt{E_d(AB) - [E_d(AA) + E_d(BB)]/2}$, где $E_d(AB)$, $E_d(AA)$ и $E_d(BB)$ – энергии диссоциации молекул AB, AA и BB, параметр $(\Delta V)^{-1/2}$ вводится для безразмерности результата. Шкала уточнена с учётом новых термохимич. данных амер. химиком А. Оллредом (1961). Согласно уточнённой шкале, Э. меняется от 0,70 для Fr и 0,79 для Cs до 3,98 для F, 3,16 для Cl, 3,44 для O и 2,10 для H.

Свою шкалу, основанную на определении Э. как полусуммы энергии ионизации и сродства к электрону и позднее названную абсолютной Э., предложил Р. *Малликен* (1935). Известна шкала Оллреда – Рохоу, основанная на расчёте электростатич. сил для 44 химич. элементов (1958); значение Э. определяется как $\chi = 0,359 Z_{\text{эфф}} / r^2 + 0,744$, где $Z_{\text{эфф}}$ – эффективный заряд ядра по Слэтеру, r – атомный ковалентный радиус. Для расчёта Э. предложены также методы С. С. Бацанова (1962, СССР), Р. Т. Сандерсона (1983, США), Л. К. Аллена (1989, США), Ю. Р. Луо и С. Бенсона (1989, США).

Эмпирич. формулы связывают Э. с термохимич. данными, длиной и полярностью связей, спектральными характеристиками, ковалентными радиусами атомов и др.

Термин «Э.» введён Й. *Берцелиусом* в 1811.

Литература

Лит.: Бацанов С. С. Электроотрицательность элементов и химическая связь. Новосиб., 1962; Хьюи Дж. Неорганическая химия. М., 1987.