

УДК 539.194:541.65

А.Н. ПАНКРАТОВ, А.Е. ЦАВЛЕВ

ЭЛЕКТРООТРИЦАТЕЛЬНОСТЬ, ИНДУКТИВНЫЕ И МЕЗОМЕРНЫЕ ПАРАМЕТРЫ АТОМНЫХ ГРУПП: ПОЛУЭМПИРИЧЕСКАЯ КВАНТОВОХИМИЧЕСКАЯ ОЦЕНКА

Установлена зависимость электроотрицательности, значений индуктивного параметра ρ , мезомерных дипольных моментов заместителей от характеристик электронной структуры органических молекул, рассчитанных методами CNDO/2, INDO, MINDO, MINDO/3, MNDO, AM1. Показана возможность простой полуэмпирической квантовохимической оценки электроотрицательности, индуктивных и мезомерных свойств атомных групп.

Электроотрицательность (ЭО) атомных групп [1], их индуктивные и мезомерные эффекты [2, 3], выражаемые, в частности, параметрами, следующими из принципа линейности свободных энергий [4], исключительно важны для описания химической связи, межмолекулярных взаимодействий физико-химических свойств веществ и молекул, исследования реакционной способности, катализа, сольватации, экстракции [5—7].

Цель работы — выяснение возможности полуэмпирической квантовохимической оценки ЭО, индуктивных и мезомерных характеристик атомных групп X на примерах молекул CH_3X , XCH_2COOH , *n*- $\text{C}_5\text{H}_{11}\text{X}$, $\text{C}_6\text{H}_5\text{X}$, 4- $\text{XC}_6\text{H}_4\text{NH}_2$, 4- $\text{XC}_6\text{H}_4\text{NO}_2$, 2,6-дизамещенных пиридинов $\text{C}_5\text{H}_3\text{NX}_2$ и катионов N-метилпиридиния $\text{C}_5\text{H}_3\text{N}^+\text{CH}_3\text{X}_2$.

Электронная структура молекул названных соединений рассчитана методами ССП МО ЛКАО CNDO/2 [8], INDO [9], MINDO [10,11], MINDO/3 [12] по программам комплексов ВИКИНГ [13] и GEOMO [14] для фиксированных пространственных параметров. Расчеты методами MNDO [15,16] и AM1 [17,18] проводили по программам из пакета MOPAC [19] с полной оптимизацией геометрии.

Регрессионный анализ осуществляли для уровня доверительной вероятности 0,95.

В качестве объективного критерия суммарной электроноакцепторной способности и ЭО заместителей X в молекулах CH_3X , XCH_2COOH , *n*- $\text{C}_5\text{H}_{11}\text{X}$, $\text{C}_6\text{H}_5\text{X}$, 4- $\text{XC}_6\text{H}_4\text{NH}_2$, 4- $\text{XC}_6\text{H}_4\text{NO}_2$, $\text{C}_5\text{H}_3\text{NX}_2$, $\text{C}_5\text{H}_3\text{N}^+\text{CH}_3\text{X}_2$ нами применена сумма (Σ) зарядов на атомах фрагментов CH_3 , CH_2COOH , C_5H_{11} , C_6H_5 , $\text{C}_6\text{H}_4\text{NH}_2$, $\text{C}_6\text{H}_4\text{NO}_2$, $\text{C}_5\text{H}_3\text{N}$, $\text{C}_5\text{H}_3\text{N}^+\text{CH}_3$. Для насыщенных систем CH_3X , XCH_2COOH , *n*- $\text{C}_5\text{H}_{11}\text{X}$ указанная величина является характеристикой эффекта ЭО групп X. Марриотт, Рейнольдс и др. при рассмотрении молекул HX использовали аналогичный индекс в рамках подходов $6-31\text{G}^*/4-31\text{G}$ [20] и $6-31\text{G}^*/6-31\text{G}^*$ [20, 21]. Сравнительный анализ электроноакцепторных свойств различных групп с использованием такого интегрального показателя достаточно корректен, так как дальность действия заместителей изменяется в ряду соединений незначительно и нерегулярно [22, 23].

Известно, что эффект ЭО атомных групп распространяется не более чем на три химические связи [2, 22]. В то же время мезомерный эффект затухает медленнее (передается через три чередующиеся двойные связи, даже если в сопряжении не участвуют вакантные орбитали или отрицательно заряженные атомы) [3]. Видимо, поэтому авторы работы [24] указывают, что заряд на *пара*-углеродном атоме кольца (q_{para}) может служить мерой $p\pi$ -сопряжения в ароматических молекулах. В принципе указанная величина может отражать и $\pi\pi$ -сопряжение, т.е. описывать мезомерные свойства как n -доноров, так и π -донорных групп.

Нами установлены 90 линейных корреляций значений ЭО, индуктивного параметра ι атомных групп, вычисляемого по формуле [25]:

$$\iota = (Z^* + 1)/n^*,$$

где Z^* — эффективный заряд валентной оболочки; n^* — эффективное главное квантовое число с суммами зарядов на атомах соответствующих молекулярных фрагментов, мезомерного дипольного момента (μ_m) заместителей X (представляющего собой векторную разность групповых моментов производных бензола и метана, а для нерегулярных групп — компоненту этой разности, приходящуюся на направление связи C—X [4]) с величинами q_{para} .

Рассмотрены значения ЭО, полученные разными экспериментальными (ИК, ЯМР спектроскопия, термохимия, анализ энергий диссоциации) и теоретическими методами.

Некоторые из корреляционных уравнений представлены в табл. 1—3.

При наличии упомянутых зависимостей недостатки полуэмпирических методов не ограничивают их применимости для оценки соответствующих свойств. Кроме того, известно, что метод CNDO/2 позволяет получать корректные данные о распределении электронной плотности в C-, H-, N-, O-, F-, Cl-содержащих органических молекулах [8, 13, 22, 23, 44, 45]. Он удачно параметризован для изучения индукционного эффекта [46, 47]. Критика схемы CNDO/2 с позиций анализа электростатической компоненты изменения конформационной энтальпии, рассчитанной из посылки о взаимодействии точечных зарядов [48], неубедительна ввиду неадекватности модели. Многочисленные данные ЯМР ^{13}C , ЯКР, фотоэлектронной спектроскопии, *ab initio* расчетов подтверждают корректность данных, полученных методом CNDO/2 [44, 45]. Результаты CNDO/2 и *ab initio* расчетов электронных влияний согласуются между собой [49].

Найденные линейные зависимости подтверждают корректность полученных нами ранее [22] рядов электроакцепторных и электронодонорных свойств заместителей в органических молекулах.

Открыта возможность простой оценки ЭО, индуктивных и мезомерных свойств атомных групп полуэмпирическими методами квантовой химии (в том числе на уровне CNDO/2) из корреляций названных величин с индексами электронной структуры молекул (Σ и q_{para}). Используемые обычно константы, вытекающие из принципа линейности свободных энергий, обладают рядом ограничений (множественность наборов, неоднозначность интерпретации и др.). Оцениваемые в настоящей работе величины (ЭО, ι , μ_m) в значительной степени лишены указанных недостатков, поскольку выражаются через характеристики, имеющие отчетливый физический смысл: Σ , q_{para} , Z^* , n^* , групповые моменты.

Установленные количественные соотношения позволяют осуществлять молекулярный дизайн органических соединений разных классов с регулируемым электронными эффектами, ЭО заместителей. Априорная оценка названных молекулярных свойств методами квантовой химии может служить основанием для экспер-

Т а б л и ц а 1

Примеры корреляций значений электроотрицательности (χ) с суммами (Σ) зарядов на атомах фрагментов R молекул RX и RX₂, рассчитанные полуэмпирическими методами квантовой химии ($\chi = B\Sigma + A$)

Набор заместителей X	R	Метод	Способ оценки электроотрицательности	Литература	B	A	r
1	2	3	4	5	6	7	8
CH ₃ , C ₆ H ₅ , CN, OH	C ₅ H ₃ N	CNDO/2	Расчет по Полингу [26] из энергий диссоциации соединений R—H, R—R, H—H	[27]	8,52 ± 1,68	1,58 ± 0,20	0,9979
CH ₃ , CH=CH ₂ , NH ₂ , OH, F	CH ₃	CNDO/2	Расчет эффективных χ связанных атомов на основе принципа выравнивания электроотрицательности с помощью абсолютных χ свободных атомов по Малликену с учетом эффектов заряда и гибридизации и использованием констант экранирования	[28]	3,95 ± 1,15	2,41 ± 0,11	0,9877
CH ₃ , CH=CH ₂ , NH ₂ , OH, F	CH ₂ COOH	CNDO/2	Тот же	[28]	3,60 ± 0,98	2,52 ± 0,09	0,9892
CH ₃ , CH=CH ₂ , NH ₂ , OH, F	C ₆ H ₅	CNDO/2	»	[28]	3,72 ± 1,31	2,42 ± 0,14	0,9821
CH ₃ , CH=CH ₂ , NH ₂ , OH, F	C ₆ H ₄ NH ₂	CNDO/2	»	[28]	3,84 ± 1,25	2,38 ± 0,14	0,9847
CH ₃ , CH=CH ₂ , NH ₂ , OH, F	C ₆ H ₅	INDO	»	[28]	3,18 ± 0,95	2,41 ± 0,12	0,9871
CH ₃ , CH=CH ₂ , NH ₂ , OH, F	C ₆ H ₅	MINDO/3	»	[28]	2,23 ± 0,80	2,43 ± 0,14	0,9815
CH ₃ , NH ₂ , N(CH ₃) ₂ , OH, OCH ₃	CH ₃	CNDO/2	Расчет методом итераций для насыщенных структур	[29, 30]	8,34 ± 1,24	2,55 ± 0,09	0,9967
CH ₃ , NH ₂ , N(CH ₃) ₂ , OH, OCH ₃	CH ₂ COOH	CNDO/2	Тот же	[29, 30]	7,48 ± 1,52	2,79 ± 0,08	0,9939
CH ₃ , CH=CH ₂ , CCH, COOH, CN, NH ₂ , OH	CH ₃	CNDO/2	Вычисление с использованием модифицированной формулы Горди [31], связывающей χ атома с числом валентных электронов и ковалентным радиусом	[32]	8,48 ± 1,66	2,44 ± 0,09	0,9858

Продолжение табл. 1

1	2	3	4	5	6	7	8
CH ₃ , CH=CH ₂ , CCH, COOH, CN, NH ₂ , OH	CH ₂ COOH	CNDO/2	Тот же	[32]	7,54 ± 1,25	2,68 ± 0,05	0,9898
H, CH ₃ , CN, OH, F	CH ₃	AM1	Оценка по сводной системе, базирующейся на термохимических данных	[33]	9,24 ± 1,28	2,67 ± 0,26	0,9769
H, CH ₃ , OH, F	C ₃ H ₁₁	AM1	Расчет из неэмпирической электростатической модели [34]	[35]	8,28 ± 1,28	2,51 ± 0,15	0,9987
H, CH ₃ , CH=CH ₂ , CCH, CHO, COOH, CN, NH ₂ , NHCH ₃ , N(CH ₃) ₂ , OH, OCH ₃ , OC ₆ H ₅ , NO	CH ₃	CNDO/2	Расчет по формуле Горди [31] с учетом влияния окружения на рассматриваемый атом	[36, 37]	9,98 ± 2,08	2,54 ± 0,13	0,9493
H, CH ₃ , CH=CH ₂ , CCH, CHO, COOH, CN, NH ₂ , NHCH ₃ , N(CH ₃) ₂ , OH, OCH ₃ , OC ₆ H ₅ , NO	CH ₂ COOH	CNDO/2	Тот же	[36, 37]	9,43 ± 1,92	2,82 ± 0,09	0,9513
H, CH ₃ , CH=CH ₂ , CCH, CHO, COOH, CN, NH ₂ , NHCH ₃ , N(CH ₃) ₂ , OH, OCH ₃ , OC ₆ H ₅ , NO	C ₆ H ₅	CNDO/2	»	[36, 37]	9,78 ± 2,48	2,48 ± 0,17	0,9277
CH ₃ , CH=CH ₂ , CCH, CN, NH ₂ , OH, NO	C ₆ H ₄ NH ₂	CNDO/2	»	[36, 37]	9,22 ± 2,63	2,27 ± 0,09	0,9705
CH ₃ , CH=CH ₂ , CCH, CHO, COOH, CN, NH ₂ , NHCH ₃ , N(CH ₃) ₂ , OH, OCH ₃	CH ₃	CNDO/2	Расчет χ связывающей атомной орбитали в молекуле с локализованными связями через χ электронейтрального атома и орбитальные вклады в его заряд	[38, 39]	14,78 ± 2,50	2,49 ± 0,14	0,9758
CH ₃ , CH=CH ₂ , CCH, CHO, COOH, CN, NH ₂ , NHCH ₃ , N(CH ₃) ₂ , OH, OCH ₃	CH ₂ COOH	CNDO/2	Тот же	[38, 39]	13,47 ± 2,25	2,90 ± 0,09	0,9764
CH ₃ , CH=CH ₂ , CCH, CHO, COOH, CN, NH ₂ , NHCH ₃ , N(CH ₃) ₂ , OH, OCH ₃	C ₆ H ₅	CNDO/2	»	[38, 39]	14,14 ± 3,57	2,44 ± 0,22	0,9482

CH ₃ , CH=CH ₂ , CCH, CHO, COOH, CN, NH ₂ , OH	C ₆ H ₄ NH ₂	CNDO/2	»	[38, 39]	15,16 ± 3,06	2,21 ± 0,20	0,9801
CH ₃ , CH=CH ₂ , CCH, CHO, COOH, CN, NH ₂ , OH	C ₅ H ₃ N	CNDO/2	»	[38, 39]	7,55 ± 1,64	2,46 ± 0,17	0,9771
CH ₃ , CH=CH ₂ , CCH, CHO, COCH ₃ , COOH, CN, NH ₂ , OH, NO, NO ₂ , F	CH ₃	MINDO	Расчет χ_G <i>ab initio</i> с использованием принципа выравнивания электроотрицательности в рамках анализа заселенностей по Малликену	[40]	14,91 ± 3,25	8,99 ± 0,53	0,9552
CH ₃ , CH=CH ₂ , CCH, CHO, COOH, CN, NH ₂ , OH, NO, NO ₂ , F	C ₆ H ₅	MINDO	Тот же	[40]	15,92 ± 3,63	9,04 ± 0,57	0,9572
H, CH ₃ , CH=CH ₂ , CCH, CHO, COCH ₃ , COOH, CN, NH ₂ , NHCH ₃ , N(CH ₃) ₂ , OH, OCH ₃ , NO	CH ₂ COOH	CNDO/2	Расчет χ_G^0 <i>ab initio</i> с использованием принципа выравнивания электроотрицательности в рамках анализа заселенностей по Малликену	[40]	268,43 ± 67,91 (по Малликену)	17,55 ± 2,81	0,9344
					90,20 ± 22,81 (по Полингу)	5,69 ± 0,94	0,9344
CH ₃ , COOH, OH, NO ₂ , F	C ₅ H ₁₁	MINDO	Расчет <i>ab initio</i> в базисе 4-31G зарядов на атоме водорода 1- q_H в молекулах HX как меры ЭО групп X	[37]	1,16 ± 0,25	0,151 ± 0,049	0,9930
CH ₃ , CHO, COOH, CN, NH ₂ , OH, NO ₂ , F	C ₆ H ₅	MINDO	Тот же	[37]	1,23 ± 0,13	0,133 ± 0,022	0,9944
CH ₃ , COOH, OH, NO ₂ , F	C ₅ H ₁₁	MINDO	Расчет <i>ab initio</i> в базисе 6-31G зарядов на атоме водорода 1- q_H в молекулах HX как меры ЭО групп X	[37]	1,20 ± 0,04	0,150 ± 0,008	0,9998
CH ₃ , CHO, COOH, CN, NH ₂ , OH, NO ₂ , F	C ₆ H ₅	MINDO	Тот же	[37]	1,27 ± 0,16	0,130 ± 0,027	0,9922
H, CH ₃ , CH=CH ₂ , CCH, CHO, COOH, CN, NH ₂ , OH, OCH ₃ , NO, NO ₂ , F	CH ₃	CNDO/2	Расчет χ на основе теории молекулярной структуры Бейдера [41] с позиций анализа топологических свойств распределения электронной плотности и критической точки связи	[42]	26,96 ± 6,69 (по Малликену)	7,26 ± 0,58	0,9366
					9,08 ± 2,24 (по Полингу)	2,23 ± 0,19	0,9371

О к о н ч а н и е т а б л . 1

1	2	3	4	5	6	7	8
H, CH ₃ , CH=CH ₂ , CCH, CHO, COOH, CN, NH ₂ , OH, OCH ₃ , NO, NO ₂ , F	CH ₂ COOH	CNDO/2	Тот же	[42]	25,00 ± 6,07	8,00 ± 0,45	0,9391
					(по Малликену)		
H, CH ₃ , CH=CH ₂ , CCH, CHO, COOH, CN, NH ₂ , OH, NO, NO ₂ , F	CH ₃	INDO	»	[42]	8,42 ± 2,03	2,48 ± 0,15	0,9396
					(по Полингу)		
H, CH ₃ , CH=CH ₂ , CCH, CHO, COOH, CN, NH ₂ , OH, NO, NO ₂ , F	CH ₃	MINDO	»	[42]	21,56 ± 5,49	7,17 ± 0,58	0,9404
					(по Малликену)		
H, CH ₃ , CH=CH ₂ , CCH, CHO, COOH, CN, NH ₂ , OH, NO, NO ₂ , F	CH ₃	MINDO	»	[42]	7,26 ± 1,84	2,20 ± 0,19	0,9407
					(по Полингу)		
H, CH ₃ , CH=CH ₂ , CCH, CHO, COOH, CN, NH ₂ , OH, NO, NO ₂ , F	CH ₃	MINDO	»	[42]	14,65 ± 2,72	7,09 ± 0,44	0,9669
					(по Малликену)		
H, CH ₃ , COOH, OH, NO ₂ , F	C ₅ H ₁₁	MINDO	»	[42]	4,93 ± 0,92	2,18 ± 0,15	0,9664
					(по Полингу)		
H, CH ₃ , COOH, OH, NO ₂ , F	C ₅ H ₁₁	MINDO	»	[42]	17,63 ± 0,90	6,87 ± 0,16	0,9993
					(по Малликену)		
H, CH ₃ , CH=CH ₂ , CCH, CHO, COOH, CN, NH ₂ , OH, NO, NO ₂ , F	C ₆ H ₅	INDO	»	[42]	5,94 ± 0,31	2,10 ± 0,06	0,9993
					(по Полингу)		
H, CH ₃ , CH=CH ₂ , CCH, CHO, COOH, CN, NH ₂ , OH, NO, NO ₂ , F	C ₆ H ₅	INDO	»	[42]	20,06 ± 5,58	7,16 ± 0,63	0,9301
					(по Малликену)		
H, CH ₃ , CH=CH ₂ , CCH, CHO, COOH, CN, NH ₂ , OH, NO, NO ₂ , F	C ₆ H ₅	MINDO	»	[42]	6,76 ± 1,86	2,20 ± 0,19	0,9311
					(по Полингу)		
H, CH ₃ , CH=CH ₂ , CCH, CHO, COOH, CN, NH ₂ , OH, NO, NO ₂ , F	C ₆ H ₅	MINDO	»	[42]	16,82 ± 2,15	6,88 ± 0,32	0,9839
					(по Малликену)		
H, CH ₃ , CH=CH ₂ , CCH, CHO, COOH, CN, NH ₂ , OH, NO, NO ₂ , F	C ₆ H ₅	MINDO	»	[42]	5,66 ± 0,72	2,11 ± 0,11	0,9839
					(по Полингу)		

Т а б л и ц а 2

Зависимость между значениями индуктивного параметра ι [43] и суммами (Σ) зарядов на атомах фрагментов R молекул RX ($\iota = B\Sigma + A$)

Набор заместителей X	R	Метод	B	A	r
H, CH ₃ , CH=CH ₂ , CCH, CHO, COOH,	CH ₃	CNDO/2	5,16 ± 0,84	2,23 ± 0,07	0,9682
CN, NH ₂ , NHCH ₃ , N(CH ₃) ₂ , OH, OCH ₃ , OC ₆ H ₅ , F	CH ₂ COOH	CNDO/2	4,78 ± 0,78	2,37 ± 0,05	0,9679
H, CH ₃ , COOH, OH, F	C ₆ H ₅	CNDO/2	4,96 ± 1,14	2,20 ± 0,09	0,9398
H, CH ₃ , CH=CH ₂ , CCH, CHO, COOH,	C ₃ H ₁₁	CNDO/2	5,14 ± 1,48	2,05 ± 0,17	0,9880
CN, NH ₂ , OH, F	C ₆ H ₄ NH ₂	CNDO/2	5,07 ± 1,33	2,13 ± 0,12	0,9519
	CH ₃	INDO	4,08 ± 1,12	2,21 ± 0,11	0,9477
	C ₆ H ₅	INDO	4,13 ± 1,19	2,20 ± 0,11	0,9431

Т а б л и ц а 3

Зависимость между значениями мезомерных дипольных моментов μ_m [4] и зарядами (q_{para}) в пара-положениях ароматических колец молекул 4-YS₆H₄X по данным CNDO/2-расчетов ($\mu_m = Bq_{para} + A$)

Набор заместителей X	Y	B	A	r
CH ₃ , COCH ₃ , CN, NH ₂ , NO ₂ , F	NH ₂	-36,30 ± 8,38	4,97 ± 1,15	-0,9865
	NO ₂	-33,95 ± 7,02	1,01 ± 0,24	-0,9891

ного решения о целесообразности синтеза, порой трудоемкого, длительного, требующего жестких условий и дорогих реактивов.

Исследование, описанное в настоящей публикации, стало возможным отчасти за счет грантов № d96-16 и № d97-1381, полученных доктором химических наук профессором А.Н. Панкратовым от международной Соросовской Программы Образования в Области Точных Наук.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Черкасов А.Р., Галкин В.И., Зуева Е.М., Черкасов Р.А. // Успехи химии. – 1998. – **67**, № 5. – С. 423 – 441.
- Верещагин А.Н. Индуктивный эффект / Отв. ред. Б.А. Арбузов. – М.: Наука, 1987. – 326 с.
- Днепроvский А.С., Темникова Т.И. Теоретические основы органической химии. – Л.: Химия, 1991. – 560 с.
- Пальм В.А. Введение в теоретическую органическую химию. – М.: Высш. шк., 1974. – 446 с.
- Воловик С.В., Станинец В.И., Зефиров Н.С. // Докл. АН (Россия). – 1993. – **330**, № 3. – С. 321 – 323.
- Урусов В.С. // Журн. структур. химии. – 1994. – **35**, № 1. – С. 111 – 127.
- Розен А.М., Крупнов Б.В. // Успехи химии. – 1996. – **68**, № 11. – С. 1052 – 1079.
- Pople J.A., Segal G.A. // J. Chem. Phys. – 1966. – **44**, N 9. – P. 3289 – 3296.
- Pople J.A., Beveridge D.L., Dobosh P.A. // Ibid. – 1967. – **47**, N 6. – P. 2026 – 2033.
- Baird N.C., Dewar M.J.S. // J. Phys. Chem. – 1969. – **50**, N 3. – P. 1262 – 1274.
- Baird N.C., Dewar M.J.S., Sustmann R. // Ibid. – 1969. – **50**, N 3. – P. 1275 – 1280.
- Bingham R.C., Dewar M.J.S., Lo D.H. // J. Amer. Chem. Soc. – 1975. – **97**, N 6. – P. 1285 – 1293.
- Квантовохимические методы расчета молекул / Г.А. Щембелов, Ю.А. Устынюк, В.М. Мамаев и др. – М.: Химия, 1980. – 256 с.
- Rinaldi D. // Comput. Chem. – 1977. – **1**, N 2. – P. 109 – 114.
- Dewar M.J.S., Thiel W. // J. Amer. Chem. Soc. – 1977. – **99**, N 15. – P. 4899 – 4917.

16. Dewar M.J.S., Rzepa H.S. // *Ibid.* – 1977. – **100**, N 1. – P. 58 – 67.
17. Dewar M.J.S., Zoebisch E.G., Healy E.F., Stewart J.J.P. // *Ibid.* – 1985. – **107**, N 13. – P. 3902 – 3909.
18. Dewar M.J.S., Zoebisch E.G. // *J. Mol. Struct. Theochem.* – 1988. – **180**. – P. 1 – 21.
19. Stewart J.J.P. МОРАС, A Semi-Empirical Molecular Orbital Program // QCPE. – 1983. – Program N 455.
20. Reynolds W.F., Taft R.W., Marriott S., Topsom R.D. // *Tetrahedron Lett.* – 1982. – **23**, N 10. – P. 1055 – 1058.
21. Marriott S., Reynolds W.F., Taft R.W., Topsom R.D. // *J. Organ. Chem.* – 1984. – **49**, N 6. – P. 959 – 965.
22. Pankratov A.N. // *Ind. J. Chem.* – 1995. – **34B**, N 8. – P. 689 – 694.
23. Pankratov A.N., Shchavlev A.E. // *Monatsh. Chem.* – 1998. – **129**, N 10. – S. 1007 – 1017.
24. Берестова С.С., Терехова М.И., Бондаренко Н.А. и др. // *Журн. общ. химии.* – 1982. – **52**, № 3. – С. 513 – 516.
25. Inamoto N., Masuda Sh. // *Tetrahedron Lett.* – 1977. – N 37. – P. 3287–3290.
26. Паулинг Л. Природа химической связи / Пер. с англ. М.Е. Дяткиной; Под ред. Я.К. Сыркина. – М.:Л.: Госхимиздат, 1947. – 440 с.
27. Constantinides E. // *Proc. Chem. Soc.* – 1964. – Sept. – P. 290.
28. Ferreira R. // *Trans. Faraday Soc.* – 1963. – **59**, Pt. 5, N 485. – Pt. 1064 – 1074.
29. Gallais F., Voigt D., Labarre J.-F. // *Compt. Rend. Acad. Sci. Paris.* – 1965. – **260**, N 1. – P. 128 – 130.
30. Gallais F., Voigt D., Labarre J.-F. // *J. Chim. Phys. et Phys.-Chim. Biol.* – 1965. – **62**, N 7–8. – P. 761 – 766.
31. Gordy W. // *Phys. Rev.* – 1946. – **68**, N 11 – 12. – P. 604 – 607.
32. Chandra S., Chandra S. // *Tetrahedron.* – 1966. – **22**, N 10. – P. 3403 – 3407.
33. Бацапов С.С. Электроотрицательность элементов и химическая связь. – Новосибирск: Изд-во СО АН СССР, 1969. – 196 с.
34. Boyd R.J., Marcus G.E. // *J. Chem. Phys.* – 1981. – **75**, N 11. – P. 5385 – 5388.
35. Luo Yu-Ran, Benson S.W. // *J. Phys. Chem.* – 1990. – **94**, N 2. – P. 914 – 917.
36. Inamoto N., Masuda Sh. // *Chem. Lett.* – 1982. – N 7. – P. 1003 – 1006.
37. Inamoto N., Masuda Sh., Niwa J. // *J. Phys. Org. Chem.* – 1990. – **3**. – P. 209 – 218.
38. Mullay J. // *J. Amer. Chem. Soc.* – 1985. – **107**, N 25. – P. 7271 – 7275.
39. Mullay J. // *Structure and Bonding.* – 1987. – **66**. – P. 1 – 25.
40. Datta D. // *Proc. Ind. Acad. Sci. (Chem. Sci.)*. – 1988. – **100**, N 6. – P. 549 – 557.
41. Bader R.F.W. // *Chem. Rev.* – 1991. – **91**, N 5. – P. 893 – 928.
42. Hati S., Datta D. // *J. Comput. Chem.* – 1992. – **13**, N 7. – P. 912 – 918.
43. Inamoto N., Masuda Sh. // *Chem. Lett.* – 1982. – N 7. – P. 1007 – 1010.
44. Clark D.T., Kilcast D. // *J. Chem. Soc. A.* – 1971. – N 21. – P. 3286 – 3290.
45. Politzer P., Whittenburg S.L., Wörnheim T. // *J. Phys. Chem.* – 1982. – **86**, N 14. – P. 2609 – 2613.
46. Гинейтме В.Л., Шатковская Д.Б. // *Журн. структур. химии.* – 1984. – **25**, № 5. – С. 152 – 155.
47. Шатковская Д.Б., Гинейтме В.Л. // Там же. – 1988. – **29**, № 1. – С. 21 – 25.
48. Stollow R.D., Samal P.W., Giants Th.W. // *J. Amer. Chem. Soc.* – 1981. – **103**, N 1. – P. 197 – 199.
49. Hehre W.J., Pople J.A. // *Ibid.* – 1970. – **92**, N 8. – P. 2191 – 2197.

Саратовский государственный
университет им. Н. Г. Чернышевского
E-mail: PankratovAN@info.sgu.ru

Статья поступила
20 июля 1998 г.