

Применение электронной феноменологической спектроскопии к исследованию потенциалов ионизации и сродства к электрону гетероатомных соединений

© Ковалева Элла Александровна

Уфимский государственный нефтяной технический университет. ул. Космонавтов, 1. г. Уфа, 450064.
Россия. Тел.: +7 (917) 406-27-06. E-mail: kovaleva-ugntu@yandex.ru

Ключевые слова: электронная феноменологическая спектроскопия, широкополосные характеристики сигналов, потенциал ионизации, сродство к электрону, гетероатомные соединения.

Аннотация

Обобщены результаты применения электронной феноменологической спектроскопии (ЭФС), разработанной М.Ю. Доломатовым к прогнозированию электронных характеристик гетероатомных соединений – потенциалов ионизации (ПИ, IP) и сродства к электрону (СЭ, EA). Методологической основой ЭФС является концепция квантового континуума как носителя информации о свойствах вещества. Электромагнитное излучение испускаемое или поглощаемое квантовым континуумом позволяет получать информацию о физико-химических свойствах, электронной структуре различных веществ, в частности гетероатомных соединений и их смесей. В отличие от традиционных подходов, ЭФС рассматривает электронные состояния молекулы как единую квазинепрерывную квантовую среду. Это позволяет определять различные свойства в том числе характеристики электронного строения вещества по их широкополосным спектральным сигналам без выделения отдельных характеристических полос. Основным инструментом прогнозирования служат интегральные характеристики сигнала: интегральная сила осциллятора (ИСО), автокорреляционная функция (АКФ) и др. ИСО – интегральный спектроскопический параметр, отражающий общую интенсивность взаимодействия вещества с электромагнитным излучением в заданном диапазоне. Использование ИСО в качестве спектроскопического дескриптора обеспечивает надёжный прогноз ПИ и СЭ, минимизируя необходимость в ресурсоёмких квантово-химических расчётах и прямых экспериментальных измерениях. В работе систематизированы эмпирические модели, устанавливающие количественные корреляции между электронными характеристиками молекул и интегральными параметрами широкополосных спектров. Представлены наборы эмпирических коэффициентов и статистических характеристик для прогнозирования ПИ и СЭ гетероатомных систем.

Выходные данные для цитирования русскоязычной печатной версии статьи:

Ковалева Э.А. Применение электронной феноменологической спектроскопии к исследованию потенциалов ионизации и сродства к электрону гетероатомных соединений. *Бутлеровские сообщения*. 2026. Т.87. №8. С.41-51. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/26-87-8-41

Выходные данные для цитирования русскоязычной электронной версии статьи:

Ковалева Э.А. Применение электронной феноменологической спектроскопии к исследованию потенциалов ионизации и сродства к электрону гетероатомных соединений. *Бутлеровские сообщения А*. 2026. Т.14. №3. Id.12. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/26-87-8-41/ROI-jbc-A/26-14-3-12 (Russian)

The output for citing the English online version of the article:

Ella A. Kovaleva. Application of electronic phenomenological spectroscopy to the study of ionization potentials and electron affinities of heteroatomic compounds. *Butlerov Communications A*. 2026. Vol.14. No.3. Id.12. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/26-87-8-41/ROI-jbc-A/26-14-3-12

Литература

- [1] Доломатов М.Ю. Применение электронной спектроскопии в физико-химии многокомпонентных стохастических смесей и сложных молекулярных систем. *Уфа: ЦНТИ*. 1989. 47с. [M.Yu. Dolomatov. Application of electron spectroscopy in the physicochemistry of multicomponent stochastic mixtures and complex molecular systems. *Ufa: CNTI*. 1989. 47p. (Russian)]

- [2] Долوماتов М. Ю., Карташева В. В. Определение свойств нефтей и нефтепродуктов по корреляциям «цвет-свойство» и «спектр-свойство». *Химическая технология*. **2004**. № 2. С.12-14. [M.Yu. Dolomatov, V.V. Kartasheva. Determination of the properties of petroleum and petroleum products by correlations «color-property» and «spectrum-property». *Chemical Technology*. **2004**. No.2. P.12-14. (Russian)]
- [3] Ковалева Э.А. Электронная феноменологическая спектроскопия в исследовании полициклических углеводородов. *Бутлеровские сообщения В*. **2026**. Т.85. №2. С.17-36. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/26-85-2-17/ROI-jbc-RB/26-12-1-3 [Ella A. Kovaleva. Electronic phenomenological spectroscopy in the study of polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs). *Butlerov Communications B*. **2026**. Vol.85. No.2. P.17-36. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/26-85-2-17/ROI-jbc-B/26-12-1-3]
- [4] Мак-Дональд Р. Цвет в промышленности. Под ред. Р. Мак-Дональда; пер. с англ. И.В. Пановой, П.П. Новосельцева; под ред. Ф.Ю. Телегина. *Москва: Логос*. **2002**. 579с. ISBN 5-94010-175-5. Пер. изд.: Color physics for industry. 1997. [R. MacDonald. Color physics for industry. Ed. by R. MacDonald; transl. from Eng. by I.V. Panova, P.P. Novoseltsev; Ed. by F.Yu. Telegin. *Moscow: Logos Publ*. **2002**. 579p. Translation of the book “Color physics for industry”. 1997. (Russian)]
- [5] M. Dolomatov. New results in the theory and practical application of color. Color detection. Ed. by L.-W. Zeng, S.-L. Cao. *London: IntechOpen*. **2019**. P.10-38. DOI: 10.5772/intechopen.84832
- [6] Ермаков А.И. Квантовая механика и квантовая химия. В 2-х ч. Ч.2: Квантовая химия: учебник и практикум для вузов. *Москва: Издательство Юрайт*. **2024**. 402с. [A.I. Ermakov. Quantum mechanics and quantum chemistry. In 2 parts. Part 2: Quantum chemistry: textbook and workbook for universities. *Moscow: Yurayt Publishing House*. **2024**. 402p. (Russian)]
- [7] Долوماتов М.Ю. Электронная феноменологическая спектроскопия и её применение в исследовании сложных молекулярных систем в технологии, химии, физике и медицине: монография. Под науч. ред. М.Ю. Доломатова. *Казань: Инновационно-издательский дом «Бутлеровское наследие»*. Бутлеровское наследие; книга 6. **2024**. 308с. ISBN 978-5-6047662-4-8. [M.Yu. Dolomatov. Electron phenomenological spectroscopy and its application in the study of complex molecular systems in technology, chemistry, physics and medicine: monograph. Ed. by M. Yu. Dolomatov. *Kazan: Innovation and Publishing House «Butlerov Heritage»*. Butlerov Heritage; Book 6. **2024**. 308p. ISBN 978-5-6047662-4-8. (Russian)]
- [8] Долوماتов М.Ю. Фрагменты теории реального вещества как систем с химическим хаосом: (от углеводородных веществ к галактикам). Изд. 2-е, перераб. и доп. *Москва: ООО «Издательский дом Недра»*. **2025**. 360с. ISBN 978-5-8365-0533-2. [M.Yu. Dolomatov. Fragments of the theory of real matter as systems with chemical chaos: (from hydrocarbon substances to galaxies). 2nd ed., rev. and augm. *Moscow: Nedra Publishers LLC*. **2025**. 360p. (Russian)]
- [9] Артеменко А.И. Органическая химия. Изд. 7-е, стер. *Санкт-Петербург: ЛАНЬ*. **2024**. 540с. ISBN 978-5-507-47637-4. [A.I. Artemenko. Organic Chemistry. 7th ed., revised. *Saint Petersburg: LAN'.* **2024**. 540p. (Russian)]
- [10] Долوماتов М.Ю., Ковалева Э.А., Латыпов К.Ф. Электронная феноменологическая спектроскопия и её применение в исследовании сложных веществ в технологии, химии, нанофизике и медицине: монография. Ч. 1: Электронная феноменологическая спектроскопия в исследовании свойств и структуры молекул и наночастиц. *Уфа: РИЦ БашГУ*. **2019**. 321с. [M.Yu. Dolomatov, E.A. Kovaleva, K.F. Latypov. Electronic phenomenological spectroscopy and its application in researching complex substances in engineering, chemistry, nanophysics and medicine: monograph. Part 1: Electronic phenomenological spectroscopy in the study of the properties and structure of molecules and nanoparticles. *Ufa: BashGU Publ*. **2019**. 321p. (Russian)]
- [11] C. Zhan, J.A. Nichols, D.A. Dixon. Ionization potential, electron affinity, electronegativity, hardness, and electron excitation energy: Molecular properties from density functional theory orbital energies. *The Journal of Physical Chemistry A*. **2003**. Vol. 107. No.20. P.4184-4195.
- [12] A.N. Ayyash, D.K. Kafi, A.N. Ayyash. A review of computational methods for electron affinity in determined molecules. *Journal of University of Anbar for Pure Science (JUAPS)*. **2022**. Vol.16. No.2. P.63-68.
- [13] Lee S. Mastering Koopmans' theorem in computational chemistry [Электронный ресурс]. *Number Analytics*. **2025**. URL: <https://www.numberanalytics.com/blog/mastering-koopmans-theorem>
- [14] Долوماتов М.Ю., Латыпов К.Ф., Ковалева Э.А. Прогнозирование вертикальных потенциалов ионизации органических соединений по интегральным характеристикам оптических спектров и числу протонов в молекулах. *Бутлеровские сообщения*. **2019**. Т.58. №6. С.62-72. ROI: jbc-01/19-58-6-62 [M.Yu. Dolomatov, K.F. Latypov, E.A. Kovaleva. Prediction of vertical ionization potentials for organic compounds by integral characteristics of optical spectra and the number of protons in molecules. *Butlerov Communications*. **2019**. Vol.58. No.6. P.62-72. ROI: jbc-01/19-58-6-62 (Russian)]
- [15] Долوماتов М.Ю., Петров А.М., Бахтизин Р.З., Доломатова М.М., Хайрудинов И.Р., Шуткова С.А., Ковалева Э.А., Паймурзина Н.Х. Асфальтены как новые объекты для наноэлектроники.

- 3-я Международная конференция по структурным наноккомпозитам (NANOSTRUC2016). *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*. **2017**. №195. 012005. С.1-5. DOI: 10.1088/1757-899X/195/1/012005. [M.Yu. Dolomatov, A.M. Petrov, R.Z. Bakhtizin, M.M. Dolomatova, I.R. Khairudinov, S.A. Shutkova, E.A. Kovaleva, N.Kh. Paymurzina. Asphaltenes as new objects for nanoelectronics. 3rd International Conference on Structural Nano Composites (NANOSTRUC2016). *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*. **2017**. No.195. 012005. P.1-5. DOI: 10.1088/1757-899X/195/1/012005. (Russian)]
- [16] Латыпов К.Ф., Доломатов М.Ю. Взаимосвязь первых потенциалов ионизации и интегральных сил осцилляторов электронных спектров для азотсодержащих природных соединений. *Башкирский химический журнал*. **2011**. Т.18. №3. С.143-146. [K.F. Latypov, M.Yu. Dolomatov. The correlation of the first ionization potentials and integrated oscillator strengths of electronic spectra of nitrogen-containing natural compounds. *Bashkir Chemical Journal*. **2011**. Vol.18. No.3. P.143-146. (Russian)]
- [17] Латыпов К.Ф., Доломатов М.Ю. Оценка сродства к электрону молекулярных кислородсодержащих органических полупроводников по интегральным характеристикам поглощения УФ- и видимого излучения. *Электротехнические и информационные комплексы и системы*. **2013**. Т.9. №1. С.107-111. [K.F. Latypov, M.Yu. Dolomatov. Estimation of electron affinity of oxygen-containing molecular semiconductors based on integral absorption characteristics in UV and visible radiation. *Electrical and Data Processing Facilities and Systems*. **2013**. Vol.9. No.1. P.107-111. (Russian)]
- [18] Доломатов М.Ю. Некоторые физико-химические аспекты прогнозирования свойств многокомпонентных систем в условиях экстремальных воздействий. *Журнал Всесоюзного химического общества им. Д.И. Менделеева*. **1991**. Т.36. №5. С.632-639. [M.Yu. Dolomatov. Some physicochemical aspects of predicting the properties of multicomponent systems under extreme conditions. *Russian Journal of General Chemistry*. **1991**. Vol.36. No.5. P.632-639. (Russian)]
- [19] Латыпов К.Ф. Прогноз потенциалов ионизации и сродства к электрону на основе интегральных спектроскопических дескрипторов на примере ряда азот- и кислородсодержащих соединений. *Дисс. ... канд. хим. наук. Казань: ОФХ им. А.Е. Арбузова*. **2020**. 224с. [K.F. Latypov. Prediction of ionization potentials and electron affinity based on integral spectroscopic descriptors. A case study of nitrogen- and oxygen-containing compounds. *PhD Thesis. Kazan: IOFKh Named after A.E. Arbuzova*. **2020**. 224p. (Russian)]
- [20] Ковалева Э.А., Доломатов М.Ю. Взаимосвязь интегральных характеристик электронных спектров поглощения с потенциалами ионизации в ряду производных 1,4-нафтохинона. *Башкирский химический журнал*. **2014**. Т.21. №2. С.44-50. [E.A. Kovaleva, M.Yu. Dolomatov. Interrelation of integrated characteristics of electronic absorption spectra with ionization potentials among 1,4-naphthoquinone derivatives. *Bashkir Chemical Journal*. **2014**. Vol.21. No.2. P.44-50. (Russian)]
- [21] Ковалева Э.А., Доломатов М.Ю. Оценка энергии ионизации органических полупроводников на основе производных антрахинона. *Электротехнические и информационные комплексы и системы*. **2013**. Т.9. №1. С.101-106. [E.A. Kovaleva, M.Yu. Dolomatov. Estimation of ionization energy of organic semiconductors based on anthraquinone derivatives. *Electrical and Data Processing Facilities and Systems*. **2013**. Vol.9. No.1. P.101-106. (Russian)]
- [22] Ковалева Э.А., Доломатов М.Ю. О связи энергии ионизации и интегральных квантовых характеристик электронных спектров поглощения в рядах ацетоксиантрахинонов. *Башкирский химический журнал*. **2012**. Т.19. №4. С.200-204. [E.A. Kovaleva, M.Yu. Dolomatov. About the connection between ionization energy and integrated quantum characteristics of electronic absorption spectra in the series of acetoxanthraquinones. *Bashkir Chemical Journal*. **2012**. Vol.19. No.4. P.200-204. (Russian)]
- [23] Шуляковская Д.О. Разработка и применение оптических методов определения физико-химических свойств высококипящих нефтяных фракций. *Дисс. ... канд. техн. наук. Уфа: УГНТУ*. **2015**. 184с. [D.O. Shulyakovskaya. Development and application of optical methods for determining the physicochemical properties of high-boiling petroleum fractions. *PhD Thesis. Ufa: UGNTU*. **2015**. 184p. (Russian)]
- [24] Доломатов М.Ю., Запорин В.П., Доломатова М.М., Паймурзина Н.Х., Ковалева Э.А., Бурангулов Д.З., Кузнецов И.Г. Разработка новых направлений оценки выхода и качества нефтяного углерода с применением электронной феноменологической спектроскопии. *Башкирский химический журнал*. **2023**. Т.30. №2. С.41-44. DOI: 10.17122/bcj-2023-2-41-44. [M.Yu. Dolomatov, V.P. Zaporin, M.M. Dolomatova, N.Kh. Paymurzina, E.A. Kovaleva, D.Z. Burangulov, I.G. Kuznetsov. Development of new directions for assessing the yield and quality of petroleum carbon using electronic phenomenological spectroscopy. *Bashkir Chemical Journal*. **2023**. Vol.30. No.2. P.41-44. DOI: 10.17122/bcj-2023-2-41-44. (Russian)]
- [25] Доломатов М.Ю., Субханкулов В.Р., Доломатова М.М., Ковалева Э.А., Вершинин С.С.,

- Белотелов О.А., Казаев И.В. Применение электронной феноменологической спектроскопии как экспресс-метода исследования свойств сырья для получения многофункциональных углеродных материалов. *Химия и технология топлив и масел*. **2025**. Т.2. №648. С.36-40.
DOI: 10.32935/0023-1169-2025-648-2-36-40. [M.Yu. Dolomatov, V.R. Subkhankulov, M.M. Dolomatova, E.A. Kovaleva, S.S. Vershynin, O.A. Belotelov, I.V. Kazaev. Application of electron phenomenological spectroscopy as a quick method for determining the properties of hydrocarbon feedstock for the production of carbon materials. *Chemistry and Technology of Fuels and Oils*. **2025**. Vol.2. No.648. P.36-40. DOI: 10.32935/0023-1169-2025-648-2-36-40. (Russian)]
- [26] Ella A. Kovaleva. Application of electronic phenomenological spectroscopy to the study of ionization potentials and electron affinities of heteroatomic compounds. *Butlerov Communications A*. **2026**. Vol.14. No.3. Id.12. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/26-87-8-41/ROI-jbc-A/26-14-3-12
- [27] Ковалева Э.А. Применение электронной феноменологической спектроскопии к исследованию потенциалов ионизации и сродства к электрону гетероатомных соединений. *Бутлеровские сообщения А*. **2026**. Т.14. №3. Id.12. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/26-87-8-41/ROI-jbc-A/26-14-3-12 (Russian)

The English version of the article has been published in the international edition of the journal

Butlerov Communications A

Advances in Organic Chemistry & Technologies

The Reference Object Identifier – ROI-jbc-A/26-14-3-12

The Digital Object Identifier – DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/26-87-8-41/ROI-jbc-A/26-14-3-12

Application of electronic phenomenological spectroscopy to the study of ionization potentials and electron affinities of heteroatomic compounds

Ella A. Kovaleva

Ufa State Petroleum Technological University. Kosmonavtov St., 1. Ufa, 450064. Russia.

Phone: +7 (917) 406-27-06. E-mail: kovaleva-ugntu@yandex.ru

Keywords: electronic phenomenological spectroscopy, broadband spectral characteristics, ionization potential, electron affinity, heteroatomic compounds.

Abstract

This study presents a comprehensive synthesis of the application of electronic phenomenological spectroscopy (EPS), a methodology pioneered by M.Yu. Dolomatov, for the prediction of key electronic properties of heteroatomic compounds, specifically ionization potentials (IP) and electron affinities (EA). The theoretical framework of EPS is grounded in the concept of the quantum continuum as an information carrier regarding the intrinsic properties of matter. Electromagnetic radiation emitted or absorbed by the quantum continuum encodes data on the physicochemical properties and electronic structure of substances, particularly heteroatomic compounds and their mixtures. Distinct from conventional approaches, EPS conceptualizes the electronic states of a molecule as a unified quasi-continuous quantum medium. This paradigm enables the determination of molecular properties and electronic structure directly from broadband spectral signals, eliminating the necessity to resolve discrete characteristic bands. Central to the predictive capability of EPS are integral signal characteristics, including the integral oscillator strength (IOS) and the autocorrelation function (ACF). The IOS, defined as an integral spectroscopic parameter, quantifies the total interaction intensity between a substance and electromagnetic radiation across a specified spectral range. Employing the IOS as a spectroscopic descriptor facilitates robust prediction of IP and EA values, thereby significantly reducing reliance on computationally demanding quantum-chemical calculations and labor-intensive direct experimental measurements. The work systematizes a series of empirical models that establish quantitative correlations between molecular electronic characteristics and integral parameters derived from broadband spectra. Comprehensive sets of empirical coefficients, accompanied by relevant statistical metrics, are provided to enable reliable prediction of IP and EA for diverse heteroatomic systems.