

## **ЭНЕРГИЯ ХИМИЧЕСКИХ СВЯЗЕЙ: ОСНОВНЫЕ ЗАКОНОМЕРНОСТИ**

Виноградова М.Г.

*Тверской институт экологии и права*

*Тверь, Россия*

## **ENERGY OF CHEMICAL BOND: BASIC REGULARITIES**

Vinogradova M.G.

Tver Institute of Ecology and Law

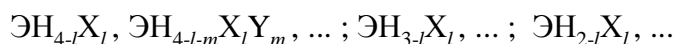
Tver, Russia

Установление связи между свойствами веществ и строением молекул составляет фундаментальную научную проблему химии, в решении которой важное место имеет разработка методов расчета и прогнозирования [1].

Энергия химической связи – основная количественная характеристика связи, одна из главных физико-химических величин, необходимых для решения многих задач теоретической и прикладной химии. Экспериментальные сведения по энергиям связей в различных классах органических (и иных) соединений весьма скудны и порой разноречивы [2]. Поэтому важное значение имеет развитие расчетных методов их определения и предсказания и получение с помощью этих методов новой (ранее недоступной) информации.

Нами разработаны эффективные методы расчета средних энергий связей и энергий разрыва связей на основе концепции попарных и более сложных взаимодействий атомов. Специальное внимание обращено на обоснование методов, их алгоритмическую и вычислительную реализуемость, определение параметров схем (через реперные опытные данные, квантовомеханические интегралы или атом-атомные потенциальные функции). Выяснены также взаимоотношения с другими методами, встречающимися в литературе.

Дан анализ состояния числовых данных по энергиям разрыва связей в органических (частично, элементоорганических) соединениях различных классов, выполнены их численные расчеты в рядах мало изученных и не изученных соединений, таких как



( $\text{Э} = \text{C}, \text{Si}, \text{Ge}, \dots$ ;  $\text{X}, \text{Y}, \dots = \text{D}, \text{T}, \text{F}, \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}, \text{CH}_3, \text{NO}_2, \dots$ ). На основе анализа экспериментального и расчетного материала выявлены определенные закономерности в энергиях связей, дано им объяснение.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект 04-03-96703p2004Центр-а)*

### **Список литературы**

1. Папулов Ю.Г., Левин В.П., Виноградова М.Г. Строение вещества в естественной картине мира: Молекулярные аспекты. Учебное пособие, 2-ое издание. Тверь: ТвГУ, 2005. 208 с.
2. Гурвич Л.В., Карачевцев Г.В., Кондратьев В.Н., Лебедев Ю.А., Медведев В.А., Потапов В.К., Ходеев Ю.С. Энергии разрыва химических связей. Потенциалы ионизации и средство к электрону. М.: Наука, 1974. 351 с.