

**Редакционный комментарий:** Уважаемые коллеги! В цикле работ автора, высказывается необычная и чрезвычайно оригинальная точка зрения на природу химической связи в молекулах. Эта точка зрения является альтернативной существующим представлениям, основанным на решениях уравнения Шредингера (но не оспаривает их правомерности!). Автор использовал иную форму описания энергетических состояний электронов в молекулах. Данная статья является дискуссионной и ее публикация не означает безоговорочной поддержки редколлегией журнала авторской концепции.

Основу подхода составляет модифицированное уравнение Юкавы, описывающее взаимодействие нуклонов в атомных ядрах. Классическая формула Юкавы (см. статью) описывает взаимодействия нуклонов на расстояниях  $10^{-13}$  см. Автор применил выражение потенциала для описания взаимодействий на расстояниях  $10^{-8}$  см. Взаимодействия нуклонов в атомном ядре осуществляются за счет обмена мезонами. Для описания взаимодействия атомов в молекуле, в соответствии с потенциалом Юкавы, автором заложен обмен квазичастицами. В качестве последних рассматривается пара электронов с антипараллельными спинами. Подобная пара обладает свойствами бозона. Поведение и энергетические состояния подобной квазичастицы могут быть описаны потенциалом Юкавы, при этом, с учетом принципа неопределенности Гейзенберга, для данного бозона, если учитывать только энергетику, можно считать, что он одновременно присутствует во всем межатомном пространстве. Поэтому любые изменения даже на сверхмалых расстояниях, мгновенно будут находить отклик в межатомных взаимодействиях. Автором рассмотрены последствия замены механизма взаимодействия атомов, основанного на электростатике на механизм обмена бозоном. Редколлегия журнала особо подчеркивает, что авторский подход не исключает устоявшуюся важную роль уравнения Шредингера. В настоящее время оно является краеугольным камнем теоретической химии и его применимость подтверждена множеством экспериментальных данных на протяжении более 75-ти лет. Однако любой вопрос, в том числе и природа химической связи, может быть рассмотрен с нескольких точек зрения. Факт того, что автору удалось добиться хороших вычислительных результатов, делает предлагаемый метод удобным приближением, облегчающим расчетные процедуры. Целью публикации является также организация научной дискуссии о возможности альтернативных подходов для описания химических взаимодействий.

Тематическое направление: Химическая связь как аналог сильного взаимодействия. Часть III.

## КОЛИЧЕСТВЕННЫЕ АСПЕКТЫ ТЕОРИИ ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ ДЖИЛЬБЕРТА ЛЬЮИСА.

© Якубов Адель Ренатович

Ул. К. Либкнехта, 64а-54. г. Иркутск 664007. Россия. Тел./факс: (3952) 251-487. E-mail: [iaoubov@mail.ru](mailto:iaoubov@mail.ru)

**Ключевые слова:** теория Льюиса, потенциал Юкавы, энергия связи, ИК спектры, решение колебательной задачи.

### Резюме

Описывается новый подход к расчету энергии ковалентных связей, в котором пара электронов рассматривать как самостоятельный объект – частица со следующими характеристиками: массой, равной приведенной массе двух электронов и спином, равным нулю. Выведена новая, универсальная для любого атома характеристика, идентичная Боровскому радиусу для атома водорода, но учитывающая специфику всех атомов (названная редакцией параметром Якубова). С использованием данной характеристики определен потенциал Юкавы в приложении к ковалентным связям. На основании потенциала Юкавы, даны количественные расчеты энергии ковалентных связей в представлении Льюиса. Показана связь между энергетическими уровнями энергии связи и частотами ИК спектров.