

Решение задачи о зависимости энергии химической связи от её длины

© Якубов Адель Ренатович

Химический факультет. Иркутский государственный университет. E-mail: iaoubov@mail.ru

Ключевые слова: природа химической связи, энергия химической связи, длина химической связи, потенциал Юкавы, геометрия Гиллеспи, теорема вириала, дробные заряды, квантование энергии химической связи.

Аннотация

В статье показано, каким образом определяется зависимость энергии химической связи от её длины. Показано, что найденное решение для молекулы водорода можно свести к теореме вириала. Это решение делает доступным расчёт всего спектра возможных значений уровней энергии химической связи. Статье не рассматривается вопрос о расчёте заполнения квантовых уровней в зависимости от внешних условий, таких как влияние температуры, давления, растворителя, катализатора, субстрата и так далее. Не смотря на это, знание точных значений энергий связи для всех состояний и возможность зафиксировать инструментальными методами разницу в уровнях энергии при переходе из одного состояния в другое, позволяет однозначно определить, в каком энергетическом состоянии находится химическая связь. Напомним, что знание энергий разрываемых и вновь образующихся связей в конкретных условиях позволяет дать ответ на возможность протекания химической реакции в различных условиях. Тот факт, что зависимость энергии химической связи от её длины описывается потенциалом Юкавы и то, что постоянная взаимодействия g близко, но не равно $\frac{2}{3} e$, а также направленность химической связи даёт основание подвергнуть сомнению утверждение о том, что взаимодействие атомов образующих химическую связь имеет исключительно электромагнитную природу. Пока преждевременно утверждать, что химия как область естествознания изучает своё собственное фундаментальное взаимодействие. Но то, что химическая связь имеет признаки подобия как сильного, так и электромагнитного взаимодействия является экспериментально наблюдаемым фактом.