

## ВЗАИМОСВЯЗЬ МЕЖДУ СТРОЕНИЕМ И СВОЙСТВАМИ АЛКИЛСИЛАНОВ

\*Виноградова М.Г., Салтыкова М.Н., Ефремова А.О., Мальчевская О.А.

Тверской государственный университет, Тверь, Россия

\*mgvinog@mail.ru

Установление связи между свойствами веществ и строением молекул составляет фундаментальную научную проблему химии, в решении которой важное место занимает разработка теории и методов расчета и прогнозирования [1,2].

Целью настоящей работы является изучение количественных соотношений, связывающих физико-химические свойства алкилсиланов со строением молекул.

Для этого на основе развиваемой нами концепции попарных и более сложных взаимодействий атомов [1,2] была выработана общая методология расчета энтальпий образования молекул, средних энергий связей и энергий разрыва связей, тепловых эффектов реакций радикального распада и замещения.

Например, для замещенных метана в квадратичном приближении имеем

$$P_{\text{Эн}_{4-l}X_l} = a_0 + a_1l + a_2l^2 \quad (l = 0, 1, 2, 3, 4),$$

где  $a_0, a_1, a_2$  - параметры выраженные через внутримолекулярные взаимодействия

По данной схеме нами проведены численные расчеты ряда физико-химических свойств галогензамещенных силана. Рассчитанные величины в общем согласуются с экспериментальными, причем можно сделать предсказания.

Аналогично, энергию разрыва связей в ряду  $\text{Эн}_{4-l}X_l$  можно рассмотреть как квадратичную функцию числа заместителей ( $l$ )

$$-D_{\text{Э}}^l\text{-н} = d_0 + d_1l + d_2l^2 \quad (l = 0, 1, 2, 3),$$

$$-D_{\text{Э}}^l\text{-х} = \bar{d}_0 + \bar{d}_1l + \bar{d}_2l^2 \quad (l = 1, 2, 3, 4),$$

где  $d_0, d_1, d_2, \bar{d}_0, \bar{d}_1, \bar{d}_2$  - параметры, выражающиеся через валентные и невалентные взаимодействия. В линейном приближении исчезают  $d_2$  и  $\bar{d}_2$ ; в кубическом – возникают члены с  $l^3$ . Подобные формулы найдены для ХУ-замещенных метана и др. По данным формулам также проведены численные расчеты.

Например, для энергий разрыва связей в метилзамещенных силана при 298 К имеем [2,3] (в кДж/моль):

	$\text{SiH}_4$	$\text{SiH}_3\text{CH}_3$	$\text{SiH}_2(\text{CH}_3)_2$	$\text{SiH}(\text{CH}_3)_3$	$\text{Si}(\text{CH}_3)_4$
$D_{\text{Si-H}}$	$395 \pm 13$	496*	477	339	-
$D_{\text{Si-CH}_3}$	-	$400 \pm 42$	431*	477	300

Здесь звездочкой отмечены вычисленные нами значения.

В работе также дана и теоретико-графовая интерпретация аддитивных схем расчета алкилсиланов и их хлорзамещенных [4]. Проведены численные расчеты энтальпии образования  $\Delta_f H^0(\text{г}, 298 \text{ К})$  выбранных соединений в разных приближениях; построены графические зависимости “Свойство-степень замещения” и др.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект 07-03-96403-рЦентр-а)

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Папулов Ю.Г., Виноградова М.Г. Расчетные методы в атом-атомном представлении. Тверь: ТвГУ, 2002. - 232 с.
2. Виноградова М.Г., Папулова Д.Р. // Фундаментальные исследования. - 2009. - 5. С. 25-26.
3. 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 сродство к электрону. М.: Наука, 1974. 351 с.
4. Виноградова М.Г., Салтыкова М.Н., Артемьев А.А. // Фундаментальные исследования. - 2009. - 1. С. 17-19.