

ПРИМЕНЕНИЕ «КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ АТОМОВ В МОЛЕКУЛЕ» К УСТАНОВЛЕНИЮ КОЛИЧЕСТВЕННЫХ СООТНОШЕНИЙ «СТРОЕНИЕ- СВОЙСТВО»

В.В. Туровцев, Е.М. Чернова, Ю.Д. Орлов

Тверской государственный университет

Квантовая механика рассматривает молекулу как совокупность ядер, погруженных в электронную плотность. Классическая теория строения – как систему взаимодействующих атомов. «Квантовая теория атомов в молекуле» (QТАИМ) позволяет разделить электронную плотность «топологические» атомы. В QТАИМ «топологические» атомы и атомные группировки есть физические тела в реальном пространстве, обладающие зарядом, объемом и энергией. Это позволяет качественно и количественно изучать внутри и межмолекулярные явления и характеризовать их величинами свойств посредством анализа распределения электронной плотности.

Нами в рамках QТАИМ были изучены гомологические ряды алканов, *n*-нитроалканов, *n*-алкантиолов, простых спиртов, альдегидов и карбоновых кислот. Для каждого соединения были определены заряды, объемы, энергии атомных и функциональных групп. На основе анализа зарядов были изучены индуктивные эффекты, найдена дальность распространения и степень затухания возмущений вдоль углеводородной цепи.

Сравнение формально одинаковых групп в различных гомологических рядах позволило выделить положения «стандартных» групп внутри углеводородной цепи и найти их невозмущенные свойства. Эти группы, находящиеся в разных молекулах, в том числе в разных гомологических рядах, обладают одинаковыми парциальными электронными характеристиками (в пределах погрешности расчета), т.е. обладают определенной степенью переносимости. Их использование позволяет снизить ошибку и расширить область применения аддитивных методов.

Установление количественных корреляций «строение-свойство» в рамках QТАИМ дает возможность моделировать молекулу как совокупность «стандартных» и возмущенных групп с известными вкладами и находить полное свойство молекулы с наименьшей методической погрешностью. Таким образом, QТАИМ закладывает квантовомеханическую основу аддитивных подходов.