



УДК 530.145+622.233

© 2010

В. В. Соболев

## Закономерности изменения энергии химической связи в поле точечного заряда

(Представлено академиком НАН Украины Г. Г. Пивняком)

*На прикладі молекул CO та CO<sub>2</sub> досліджені закономірності змінювання енергії хімічного зв'язку залежно від відстані до кулонівського центра та величини заряду. Зокрема, встановлено, що при наближенні до заряду енергія зв'язку (або ступінь стійкості зв'язку) зменшується і на певній відстані від заряду відбувається розрив зв'язку; при незмінній відстані ймовірність розриву зв'язку зростає із збільшенням заряду. Припускається, що механізм дії каталізаторів у хімічних реакціях зумовлений впливом поля заряду на стійкість хімічного зв'язку.*

Большой практический и научный интерес вызывают химические процессы, протекающие с участием углерода — элемента, необходимого для жизни животных и растений, образования некоторых минералов и всех без исключения горючих полезных ископаемых. В земной коре наиболее распространенными неорганическими соединениями углерода являются карбонаты, содержание которых по различным оценкам составляет  $10^{16}$  т. Около  $10^{13}$  т углерода содержится в углях, природных газах, нефти и других горючих ископаемых. В чистом виде углерод представлен графитом, алмазом и другими минералами, но в свободном атомарном состоянии не встречается. За счет жизнедеятельности человека, животных и растений, вулканических и других физико-химических процессов, протекающих в земной коре, работы промышленных предприятий атмосфера Земли непрерывно пополняется газами CO, CO<sub>2</sub> и из этого количества флора Земли ежегодно потребляет около  $10^{10}$  т углерода.

Особое внимание привлекает углекислый газ как один из основных компонентов, участвующих в фотосинтезе, и, возможно, в образовании углеродных минералов, твердых, жидких и газообразных горючих ископаемых. В химических реакциях, вызывающих рост и обеспечивающих “дыхание” растений, клеток живых организмов и минеральных углеродных фаз, принимает участие атомарный углерод, выделяющийся при разрушении молекулы CO<sub>2</sub>. Закономерности перехода молекул CO<sub>2</sub> из устойчивого состояния к разрыву связей возможно станут полезными, например, в исследованиях механизма каталитических процессов, в том числе фотосинтеза, при производстве водорода из воды, утилизации промышленных газов и других химических процессах.

Закономерности и механизмы многих реакций с участием углерода исследованы достаточно глубоко, однако неочевидным остается источник энергии, способный без заметных внешних физических воздействий (при нормальных условиях) инициировать разрыв химических связей с выделением атомарного углерода. Возможно, возбуждение и разрыв связей в молекулах происходит по сценарию некоторого универсального механизма, основанного на предположении о разрыве химической связи любой молекулы в электрическом поле точечного электрического заряд, например, иона как третьего кулоновского центра.

Целью исследований является оценка возможного влияния поля точечного заряда на изменение энергии химической связи молекулы в процессе сближения ее с точечным зарядом.

Для оценки устойчивости химической связи, на которую оказывает активное влияние поле кулоновского центра, выбрана молекула окиси углерода с энергией разрыва связи  $D \sim 1,2$  эВ (у  $\text{CO}_2 \sim 5,5$  эВ) [1]. В расчетах точечные заряды представлены ионами различной валентности. Напряженность электрического поля одновалентного иона при комнатной температуре на расстоянии одного нанометра составляет около  $1,5 \cdot 10^9$  В/м. Предполагается, что молекула  $\text{CO}$  обладает достаточной энергией, чтобы приблизиться к иону на расстояние, при котором происходит разрыв связи. В интерпретации поведения связей различных молекул будем ссылаться на характер и особенности поведения молекулы  $\text{CO}$  в поле заряда главным образом по следующей причине: энергия связи молекулы  $\text{CO}$  одна из наиболее сильных и если с ней происходят какие-либо изменения, то при таких же условиях аналогичные изменения, но с большей вероятностью произойдут и с любыми другими молекулами. Следовательно, интерпретация поведения оксида углерода в поле заряда может быть вполне корректной и в отношении диоксида углерода.

Для решения поставленной задачи использован метод [2–4], отличающийся от известного метода МО ЛКАО [5] тем, что за базис приняты многоцентровые функции в эллипсоидальных координатах, а все физические функционалы вычислены аналитически. Построенные замкнутые выражения для функций Грина позволяют решать квантово-механическую задачу с возмущениями. Кроме этого, одно из преимуществ качественного характера заключается в том, что энергетические термы для химических связей легко рассчитываются как в основном, так и в возбужденном состояниях. В этом случае появляется возможность наблюдать за динамикой химической реакции, начиная от состояния, характеризующегося устойчивой химической связью, до так называемого разрыхления химической связи и ее разрыва.

Предположим, что на химическую связь между атомами  $a$  и  $b$  действует поле электрического заряда (третьего центра), т. е. некоторое возмущение  $W(\tau)$ . Таким образом, будем рассматривать систему, состоящую из трех частиц с зарядами  $Z_1, Z_2, Z_3$  и соответствующими массами  $M_1, M_2, M_3$ , взаимодействующих по закону Кулона. Здесь заряды  $Z_1, Z_2 > 0$ , а  $Z_3 < 0$ . Гамильтониан для электрона в поле двух кулоновских центров при введении координат Якоби [2] запишется следующим образом:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M_0}\Delta_{\mathfrak{R}} - \frac{\hbar^2}{2M}\Delta_R - \frac{\hbar^2}{2m}\Delta_r + \frac{Z_1 Z_2}{R} - \frac{Z_1 Z_3}{r_a} - \frac{Z_3 Z_2}{r_b}, \quad (1)$$

где  $Z_1$  и  $Z_2$  — заряды атомов,  $Z_2 \geq Z_1$ ;  $M_0 = M_1 + M_2 + M_3$ ;  $M_1$  и  $M_2$  — массы ядер молекулы;  $M_3 \ll (M_1; M_2)$ ;  $\frac{1}{M} = \frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2}$ ;  $\frac{1}{m} = \frac{1}{M_3} + \frac{1}{M_1 + M_2}$ ;  $r_a = |R_3 - R_1|$ ,  $r_b = |R_3 - R_2|$  — расстояния от ионов  $a$  и  $b$  до рассматриваемой точки пространства валентного электрона;

$R$  — межъядерное расстояние. Будем считать, что  $M_3 \ll (M_1; M_2)$ , т. е. частица с массой  $M_3$  и зарядом  $Z_3$  может быть электроном или мезоном. В дальнейшем рассматривается задача с участием электрона. Первый член гамильтониана описывает движение центра масс системы трех частиц, второй — относительное движение частиц  $M_1$  и  $M_2$ .

В атомной системе единиц  $\hbar = Z_3 = M_3 = 1$  в эллипсоидальной системе координат уравнение Шредингера в задаче о движении электрона в поле двух неподвижных зарядов (ядер), удаленных на расстояние  $R$ , имеет вид:

$$\left\{ \frac{4}{R^2(\lambda^2 - \mu^2)} \left[ \frac{\partial}{\partial \lambda} (\lambda^2 - 1) \frac{\partial}{\partial \lambda} + \frac{\partial}{\partial \mu} (1 - \mu^2) \frac{\partial}{\partial \mu} \right] + \frac{4}{R^2(\lambda^2 - 1)(1 - \mu^2)} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right\} \psi + 2[E + U(\lambda, \mu)]\psi = 0, \quad (2)$$

где  $\lambda = (r_a + r_b)/R$ ;  $1 \leq \lambda \leq \infty$ ;  $\mu = (r_a - r_b)/R$ ;  $-1 \leq \mu \leq 1$ ;  $U(\lambda, \mu) = \frac{2}{R} \left( \frac{Z_1}{\lambda + \mu} + \frac{Z_2}{\lambda - \mu} \right)$ ;  $r_a$  и  $r_b$  — расстояния от ядер  $Z_1$  и  $Z_2$  до электрона;  $U(\lambda, \mu)$  — потенциальная энергия электрона в поле зарядов  $Z_a$  и  $Z_b$ .

Перепишав уравнение (1) в эллипсоидальных координатах и решив его совместно с уравнением (2), получим систему двух обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка

$$\left[ \frac{\partial}{\partial \mu} (1 - \mu^2) \frac{\partial}{\partial \mu} - \frac{\Lambda^2}{1 - \mu^2} - \mu^2 \varepsilon + \mu Z^- - A \right] Y(\mu) = 0, \quad (3)$$

$$\left[ \frac{\partial}{\partial \lambda} (\lambda^2 - 1) \frac{\partial}{\partial \lambda} - \frac{\Lambda^2}{\lambda^2 - 1} + \lambda^2 \varepsilon + \lambda Z^+ + A \right] X(\lambda) = 0, \quad (4)$$

где  $A$  — постоянная разделения;  $|\Lambda| = 0, 1, 2, \dots$ ;  $\varepsilon = ER^2/2$ ;  $Z^{(\pm)} = (Z_a \pm Z_b)R$ .

Анализ уравнений (3) и (4) позволил выделить модельную задачу, которой соответствует уравнение

$$\left\{ \frac{\partial^2}{\partial t^2} + \frac{1 - \Lambda^2}{4t^2} + \frac{C}{t} + \varepsilon + \frac{\partial}{\partial \mu} (1 - \mu^2) \frac{\partial}{\partial \mu} - \frac{\Lambda^2}{1 - \mu^2} + n(n+1) + \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \Lambda^2 \right\} F(t, \mu, \varphi) = 0. \quad (5)$$

Переходя от данной математической модели к реальной физической задаче, преобразуем уравнение (5), произведя при этом следующую замену  $\lambda = t + 1$ . Тогда

$$f(\lambda) = [\lambda^2 - 1]^{-1/2} X(\lambda).$$

Поскольку это преобразование нелинейно, то получаем уравнение:

$$\left\{ \frac{4}{R^2(\lambda^2 - \mu^2)} \left[ \frac{\partial}{\partial \lambda} (\lambda^2 - 1) \frac{\partial}{\partial \lambda} - \frac{\partial}{\partial \mu} (1 - \mu^2) \frac{\partial}{\partial \mu} \right] + 2[E + U(\lambda, \mu)] + \frac{4}{R^2(\lambda^2 - 1)(1 - \mu^2)} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} - \frac{4(\lambda^2 - 2)Z^- \mu}{R(\lambda^2 - \mu^2)} - \frac{2\mu^2 E(\lambda^2 - 2)}{\lambda^2 - \mu^2} + \frac{4(\lambda^2 - 2)}{R^2(\lambda^2 - \mu^2)} \left[ \frac{\partial}{\partial \mu} (1 - \mu^2) \frac{\partial}{\partial \mu} + \frac{1}{1 - \mu^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \right\} X(\lambda) Y(\mu) \Phi(\varphi) = 0. \quad (6)$$

Таким образом, решение модельной задачи принимает вид:

$$\psi = F = [t(t+2)]^{-1/2} y^{(\Lambda+1)/2} e^{y/2} \Phi\left(\frac{\Lambda}{2}k + \frac{1}{2}, \Lambda = 1, y\right) P_n^\Lambda(\mu) e^{i\Lambda\varphi}, \quad (7)$$

где  $\Phi$  — вырожденная гипергеометрическая функция.

Рассмотрим первую группу энергетических термов (при  $n = 0$ ) для случая, когда  $\Lambda = 0$ . Введем  $a_i = 2b_i = 2\sqrt{-\varepsilon_i}$ . Тогда из уравнения (7) получим явный вид модельных волновых функций  $\psi_{k,\Lambda,n}$ :

$$\psi_{\frac{1}{2},0,0} = \frac{\sqrt{a_1}}{\sqrt{t+2}} \exp\left(-\frac{a_1 t}{2}\right); \quad (8)$$

$$\psi_{\frac{3}{2},0,0} = \frac{\sqrt{a_3}}{\sqrt{t+2}} (1 - a_3 t) \exp\left(-\frac{a_3 t}{2}\right); \quad (9)$$

$$\psi_{\frac{5}{2},0,0} = \frac{\sqrt{a_5}}{\sqrt{t+2}} (1 - a_5 t + 0,5a_5^2 t^2) \exp\left(-\frac{a_5 t}{2}\right). \quad (10)$$

Здесь  $b_i$  находим по формуле

$$b_i = -2k \pm \sqrt{4k_i + 2L}, \quad (11)$$

где  $L = (\Lambda^2 - 1)/4 + n(n+1) + Z^+/2$ . Учитывая, что для связанных состояний  $b_i > 0$ , в выражении (11) выбирается знак “+”.

На основе решений модельной задачи получаем энергии состояний, соответствующие квантовым числам  $k = 5/2$ ,  $k = 3/2$  и  $k = 1/2$ , вычисленные по формуле

$$E_{k,\Lambda,n} = \frac{\langle \psi_{k,\Lambda,n} | H_0 | \psi_{k,\Lambda,n}^* \rangle}{\langle \psi_{k,\Lambda,n} | \psi_{k,\Lambda,n} \rangle}.$$

По предложенной методике проведено экранирование ядер углерода и кислорода, рассчитаны и построены электронные термы.

Если два электрона находятся в одном и том же квантовом состоянии  $(k, \Lambda, n)$ , то необходимо учитывать их взаимодействие друг с другом. Волновая функция системы двух электронов представлена в виде детерминанта Слетера

$$\psi_{\text{det}} = \begin{vmatrix} u_1(1) & u_2(1) \\ u_1(2) & u_2(2) \end{vmatrix},$$

где (1) и (2) — обозначения, представляющие собой совокупность координат первого и второго электронов соответственно;  $u_1 = \alpha\varphi(1)$ ;  $u_2 = \beta\varphi(2)$ ;  $\varphi(1)$  и  $\varphi(2)$  — базисные функции, в качестве которых используются решения модельной задачи (8)–(10).

Для того чтобы волновая функция  $\psi_{\text{det}}$  была антисимметричной, необходимо принять, что  $\alpha = \beta$ . Тогда энергия электрон-электронного взаимодействия  $E(ee)$  определится из выражения:

$$E(ee)_{k,\Lambda,n} = \frac{\left\langle \psi_{\text{det}} \left| \frac{1}{r_{1,2}} \right| \psi_{\text{det}}^* \right\rangle}{\langle \psi_{\text{det}} | \psi_{\text{det}}^* \rangle},$$

где  $1/r_{1,2}$  — энергия кулоновского взаимодействия электронов;  $r_{1,2}$  — расстояние между электронами.

При расчете матричных элементов необходимо произвести интегрирование по координатам первого и второго электронов. Для этого можно представить выражение  $1/r_{1,2}$  в виде разложения Неймана в эллипсоидальной системе координат:

$$\frac{1}{r_{1,2}} = \frac{2}{R} \sum_{p=0}^{\infty} \sum_{m=-p}^p (-1)^m (2p+1) \left[ \frac{(p-|m|)!}{(p+|m|)!} \right]^2 P_p^{|m|}(\lambda_{<}) Q_p^{|m|}(\lambda_{>}) P_p^{|m|}(\mu) Q_p^{|m|}(\mu_3) \times \\ \times e^{im(\varphi_1 - \varphi_2)},$$

где  $\lambda_i = (r_{a_i} + r_{b_i})/R$ ,  $\mu_i = (r_{a_i} - r_{b_i})/R$ ,  $i = 1, 2$ , — координаты электронов;  $\lambda_{<}$ ,  $\lambda_{>}$  — большая или меньшая из  $\lambda_1$  и  $\lambda_2$ ;  $P_p^{|m|}(\lambda_{<})$  и  $Q_p^{|m|}(\lambda_{>})$  — присоединенные функции Лежандра I и II рода.

В результате вычислений получим

$$E(ee)_{\frac{1}{2}, 0, 0} = \frac{4}{R} \left[ \left( \frac{3}{40b^2} + \frac{1}{20b} \right) (c + \ln 2b) + e^{8b} E_i^2(-8b) \left( \frac{3}{40b^2} - \frac{11}{20b} + \frac{7}{5} - \frac{8b}{15} \right) + \right. \\ \left. + e^{8b} E_i^2(-4b) \frac{4b^2}{15} + e^{4b} E_i(-4b) \left( -\frac{3}{20b^2} + \frac{1}{2b} - \frac{1}{5} \right) + \frac{1}{8b} - \frac{1}{10} \right] \times \\ \times \left[ \frac{1}{2b} - \frac{4}{3} b e^{4b} E_i(-4b) \right]^{-2}, \quad (12)$$

где  $c$  — постоянная Эйлера.

Энергию электрон-электронного взаимодействия в состояниях  $(3/2, 0, 0)$ ,  $(5/2, 0, 0)$  с удовлетворительной точностью можно рассчитывать по формуле (12), определяя  $b$  из (11).

Для расчета колебательного спектра химической связи CO использовано уравнение Шредингера, в котором энергия электронного терма аппроксимируется потенциалом Морса

$$\frac{d^2 \varphi}{dx^2} + \frac{2MR_0^2}{\hbar^2} [E - A e^{-2\alpha x} + 2A e^{-\alpha x}] \varphi = 0, \quad (13)$$

здесь  $2A e^{-\alpha x} - A e^{-2\alpha x} = V(x)$  — потенциал Морса;  $R_0$  — равновесное расстояние;  $x = (R - R_0)/R_0$ ;  $M = M_1 M_2 / (M_1 + M_2)$  — приведенная масса;  $A$  — параметр, устанавливаемый энергией диссоциации химической связи;  $\alpha$  определяется при условии пересечения модельной и реальной потенциальных кривых с осью  $R$ .

При построении зависимостей  $E(Z^{(\pm)}; R)$  интерес представляла дискретная часть спектра энергии, соответствующая значениям  $E < 0$ . Расчет энергии колебательного спектра молекулы производился по формуле, полученной в [4]:

$$E_n^m = -A \left[ 1 - \frac{\alpha \hbar}{\sqrt{2MAR_0^2}} \left( n + \frac{1}{2} \right) \right]^2.$$

Использование потенциала Морса в качестве приближения к электронному терму молекулы приводит к простому решению задачи по определению колебательных уровней, в том числе и молекулы CO, находящейся в состояниях  $(1/2, 0, 0)$  и  $(3/2, 0, 0)$  (рис. 1).

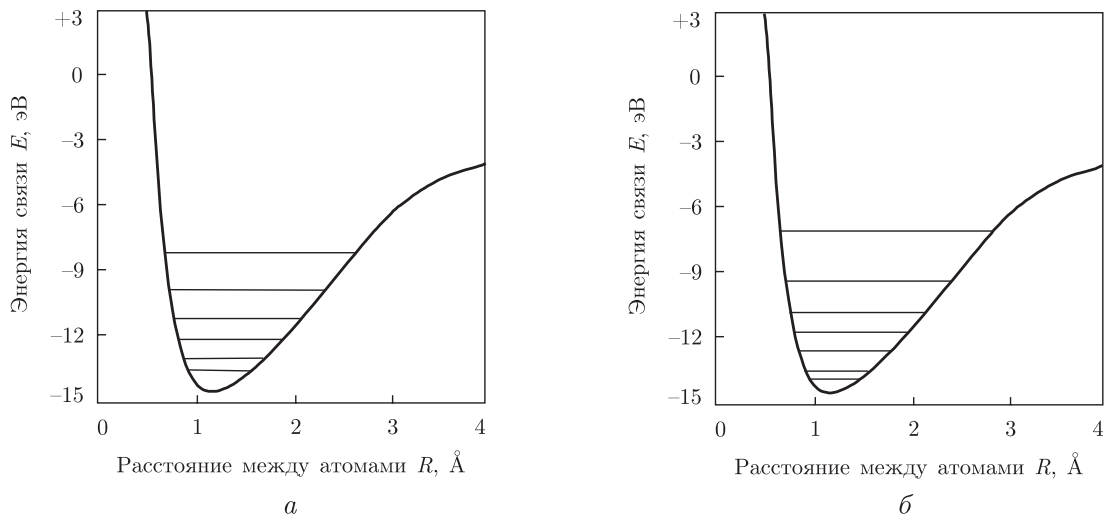


Рис. 1. Колебательные уровни молекулы CO: *a* — в состоянии  $(1/2, 0, 0)$ ; *б* — в состоянии  $(3/2, 0, 0)$

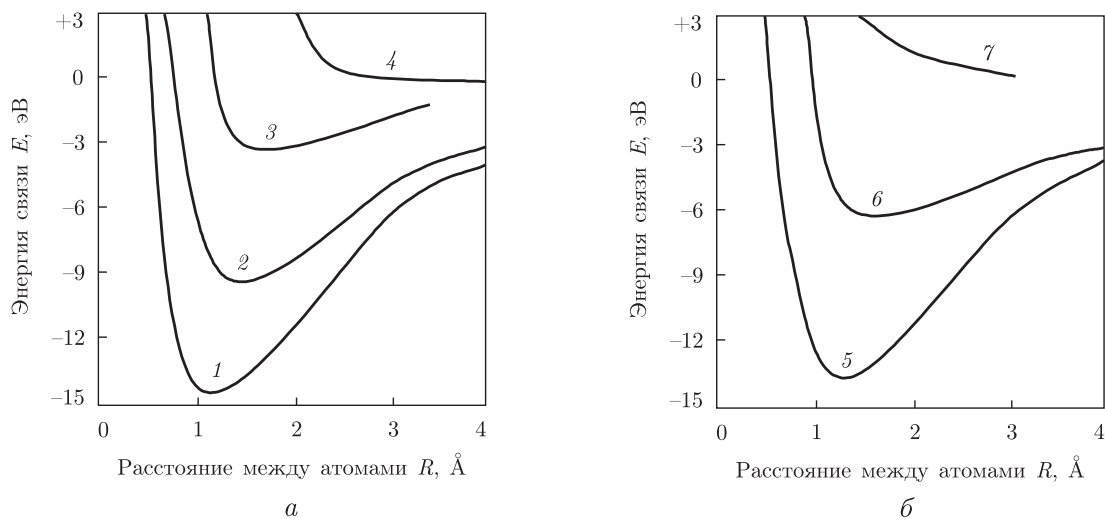


Рис. 2. Характер изменения потенциальной энергии  $E(R)$  молекулы CO в поле отрицательного заряда  $Z$ : *a* — от величины  $Z$  (расстояние  $H$  от заряда до химической связи  $2,5 \cdot 10^{-10}$  м); *б* — от расстояния  $H$  при  $Z = (-4)$ ; 1 — молекула без возмущения; 2, 3 и 4 — соответственно молекула в поле  $Z (-2)$ ,  $(-4)$  и  $(-8)$ ; 5, 6 и 7 — молекула от заряда соответственно на расстоянии  $H$  (м)  $10^{-9}$ ,  $5 \cdot 10^{-10}$  и  $1,5 \cdot 10^{-10}$

На рис. 2 представлены расчетные зависимости  $E(Z^{\pm}); R$ . Видно, что по мере приближения молекулы CO к точечному заряду или в случае увеличения заряда (при фиксированном расстоянии молекулы от заряда) наблюдается постепенное “разрыхление” химической связи, а на некотором расстоянии от заряда или при определенной величине заряда происходит ее разрыв (рис. 3).

На основании результатов вычислительных экспериментов установлено, что характер зависимостей  $E(Z^{\pm}); R$  аналогичен для других исследованных молекул. При увеличении заряда разрыхляющее действие на химическую связь молекулы усиливается, т. е. при прочих равных условиях молекула разрушается с большей вероятностью по сравнению с той, на которую влияет заряд меньшей величины.

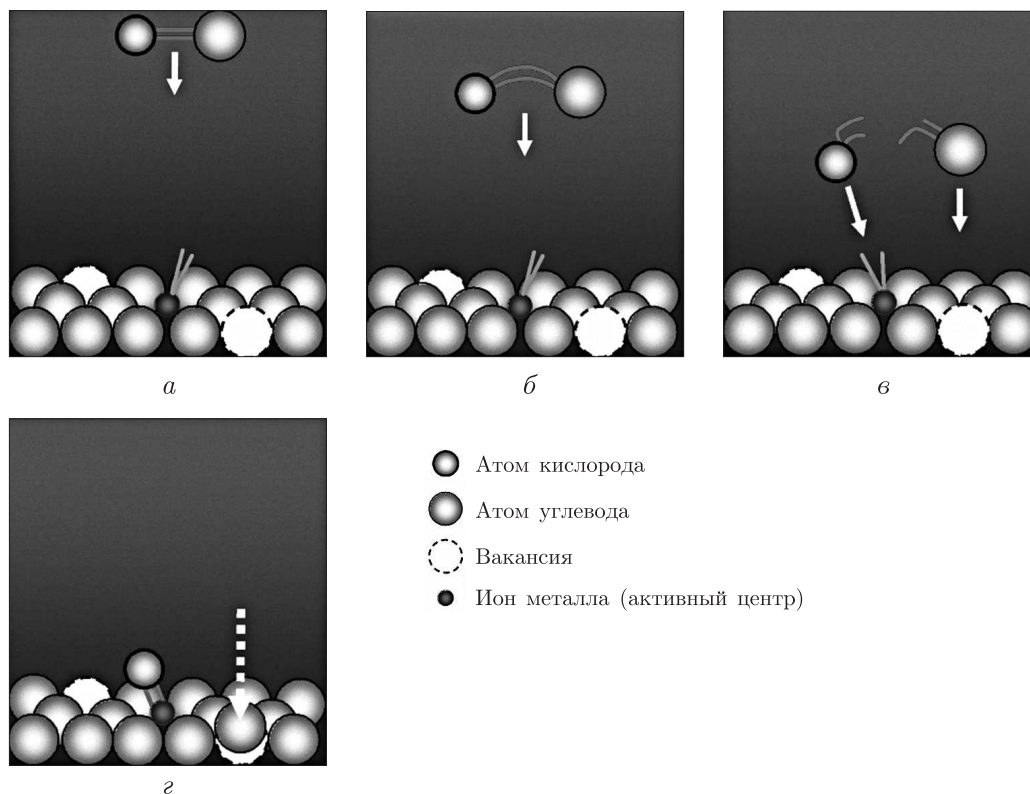


Рис. 3. Сценарий динамики элементарного химического процесса, протекающего на поверхности твердой фазы (на примере алмаза) в присутствии электрического заряда (иона металла): *a* — двухатомная молекула с устойчивой химической связью входит в зону влияния электрического заряда; *b* — напряженность поля иона “разрыхляет” химическую связь; *c* — стадия разрыва связи молекулы; *d* — стадия образования окисла металла и встраивания в поверхностный слой кристаллической решетки (алмаза) атома углерода. Связь С–С оказывается более выгодной, чем гибридная связь Me–С. Соединение Me–О может покинуть поверхность твердой фазы либо “закрепиться” на ней (Me — атом металла)

С увеличением температуры физико-химической системы функции  $E(Z^{\pm}); R$  сильно выполаживаются. Другими словами, увеличение температуры системы приводит к разрыву связей молекул на таких расстояниях от зарядов (ионов), которые в несколько раз превышают характерные межатомные расстояния в твердом теле. Наличие зарядов как активных центров на поверхности твердого тела способствует значительному снижению высоты термодинамического барьера, который необходимо преодолеть, например, при образовании зародыша новой фазы или инициирования химических реакций.

Механизм выделения атомарного углерода и кислорода в результате разрушения молекул СО или СО<sub>2</sub> в поле заряда использован как основной акт в сценарии зарождения наноразмерных кристаллов графита, маггемита и магнетита в межзерновых границах сидерита и его производных при нагревании до температур 660–700 К и одновременном воздействии внешнего электрического поля [6]. Обсуждаемый эффект является основой предложенного [7] механизма роста монокристаллов алмаза из атомарного углерода, образующегося на поверхностях алмаза в результате диссоциации молекул, содержащих углерод. При определенных условиях поле электрических зарядов, сосредоточенных на поверхностях летящих микрочастиц, в результате соударения с металлическими мишенями разрушает химические

связи в металле, создавая таким образом благоприятные условия для сверхглубокого проникновения микрочастиц в металлы [8]. Из результатов экспериментальных исследований [6–8] следует, что стимулирование химических реакций и фазовых превращений электрическими полями слабых напряженностей особенно эффективно, если вещество находится в состоянии метастабильного, а особенно — нестабильного равновесия, обусловленного дополнительной внутренней энергией, запасенной этим веществом в результате механической обработки, закалки либо других физических воздействий.

Квантово-механическая модель расчета электронных термов молекул может быть использована при конструировании новых соединений и структур в нанотехнологиях. При соответствующей модернизации кроме качественной оценки модель может дать количественную оценку устойчивости химических связей при тех или иных меняющихся условиях. Решение может быть направлено на реализацию практических задач, связанных, например, с процессами нанесения наноразмерных покрытий на поверхности твердых фаз, созданием композитов с заданными характеристиками.

Исследования физико-химических явлений на поверхностях твердых тел могут дать количественную оценку адсорбции тех или иных элементов в атомарной форме на металлах (например, процесс окисления СО на платине), что позволит объяснить механизмы многих каталитических реакций, описать кинетику адсорбции и объяснить механизмы превращений. Нам представляется, что развиваемый квантово-механический подход является перспективным, поскольку он учитывает наличие поверхностных зарядов — дополнительных источников энергии, активирующих химические процессы, раскрывает физическую суть механизма взаимодействия заряда с химическими связями и их важнейшую роль в каталитических реакциях.

*Выражаю глубокую благодарность коллегам по работе — докт. физ.-мат. наук А. В. Чернаю, канд. физ.-мат. наук. А. С. Баскевичу, научн. сотруд. А. Д. Шарабуре и Г. О. Ярковою, принявшим участие в проведении исследований.*

1. Степанов Н. Ф. Квантовая механика и квантовая химия. — Москва: Изд-во Моск. гос. ун-та, 2001. — 519 с.
2. Ярковою Г. О., Заславская Л. И., Россихин В. В. Аналитический расчет потенциальных кривых двухатомных молекул. — Киев, 1977. — 13 с. — (Препринт / АН УССР. Ин-т теор. физики).
3. Ярковою Г. О. Функция Грина для задачи электрона в поле двух кулоновских центров. — Киев, 1975. — 12 с. — (Препринт / АН УССР. Ин-т теор. физики).
4. Соболев В. В., Ярковою Г. О., Чернай А. В. Синтез алмаза. III. Теоретические исследования с применением квантово-механических методов расчета // Минералогич. журн. — 1994. — № 5/6. — С. 23–30.
5. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. Т. III. — Москва: Наука, 1974. — 752 с.
6. Соболев В. В. Имитация физико-химических процессов природного алмазообразования // Геология алмазов — настоящее и будущее. — Воронеж: Изд-во Воронеж. гос. ун-та, 2005. — С. 1580–1598.
7. Соболев В. В., Чернай А. В., Орлинская О. В. и др. Влияние температуры и электрического поля на электропроводность горных пород и минералов. 2. Сидерит // Минералогич. журн. — 2003. — № 1. — С. 91–94.
8. Sobolev V. V., Usherenko S. M. Shock-wave initiation of nuclear transmutation of chemical elements // J. de Physique. IV. — 2006. — **134**. — P. 977–982.



V.V. Sobolev

## Regularities of a change in the chemical bond energy in the field of a point charge

*By the example of molecules CO and CO<sub>2</sub>, the regularities of a change in the chemical bond energy as a function of both the distance from a Coulomb center and its charge are studied. It is found that the binding energy decreases, as the distance decreases. At a certain distance, the bond is broken. At an invariable distance, the probability of the break increases with the value of charge. It is assumed that the mechanism of the action of catalysts in chemical reactions is caused by the influence of the field of a charge on the stability of a chemical bond.*