

© А.С. Баскевич<sup>1</sup>, В.В. Куливар<sup>2</sup>, И.И. Чоботко<sup>2</sup>, А.В. Курляк<sup>3</sup>, О.А. Балакин<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Украинский государственный химико-технологический университет, Днепр, Украина

<sup>2</sup> Национальный технический университет «Днепро́вская политехника», Днепр, Украина

<sup>3</sup> Государственное предприятие «Научно-производственное объединение «Павлоградский химический завод», Павлоград, Украина

## ОБ УСТОЙЧИВОСТИ СВЯЗИ ДВУХАТОМНОЙ МОЛЕКУЛЫ В ПОЛЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ЗАРЯДА

© A. Baskevich<sup>1</sup>, V. Kulivar<sup>2</sup>, I. Chobotko<sup>2</sup>, A. Kurliak<sup>3</sup>, O. Balakin<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Ukrainian State University of Chemical Technology, Dnipro, Ukraine

<sup>2</sup> Dnipro University of Technology, Dnipro, Ukraine

<sup>3</sup> State Enterprise Research-Industrial Complex «Pavlograd Chemical Plant», Pavlograd, Ukraine

## ABOUT STABILITY OF CONNECTION OF DIATOMIC MOLECULE IN THE FIELD OF ELECTRIC CHARGE

**Цель** исследований заключается в использовании физико-математической модели и методики оценки состояния устойчивости химической связи в зависимости от величины напряженности электрического поля внешнего точечного заряда.

**Методики.** Работа выполнена в соответствии с рекомендациями методологии проведения теоретических исследований. Используются квантово-химические закономерности, описывающие кулоновские взаимодействия атомов.

**Результаты.** Предлагается гипотеза о возможном физико-химическом механизме образования дополнительных вредных газов при разрушении горных пород взрывом.

**Научная новизна.** Получил развитие метод численной оценки энергии химической связи в зависимости от расстояния связи до точечного заряда – третьего кулоновского центра. Квантово-механическая модель расчета электронных термов молекул позволяет решать задачи, связанные с определением параметров молекул в условиях воздействия различных физических полей на рассматриваемую систему. Модель апробирована на некоторых двухатомных молекулах. Расхождение экспериментальных данных с результатами расчетов не превышает 10%, что свидетельствует о вполне корректной интерпретации получаемых результатов.

**Практическая ценность.** Модель может быть использована в области исследования причин, вызывающих газодинамические явления в подземных выработках угольных шахт, в моделировании самовозгорания терриконов, в исследованиях состояния устойчивости nano-структурных компонентов угля в условиях физических воздействий, при теоретическом конструировании новых соединений и структур в области наноматериаловедения и нанотехнологий. При соответствующей модернизации кроме качественной оценки модель дает количественную оценку устойчивости химических связей при тех или иных изменяющихся условиях.

**Ключевые слова:** химический акт, кулоновский центр, разрыв связи, трехцентровая задача

**Введение.** Сложные горно-геологические условия залегания угольных пластов и как следствие – проявление в процессе их разработки различных физико-химических эффектов, связанных с десорбцией газа и воспламенением метано-воздушной смеси [1-3], внезапными выбросами угля, породы и газа [4-6], другими газодинамическими явлениями. Наиболее важными для любого угледобывающего предприятия является соблюдение правил безопасности и охраны

труда. Однако эффективное решение этих вопросов иногда противоречит стратегии применения новых технологий при интенсивной эксплуатации оборудования [7,8]. Противоречие здесь заложено не в новых технологиях или в фундаментальных правилах безопасности, а в аномальных и не предсказуемых реакциях горных пород (угля) на физико-механические воздействия. Так техногенные газодинамические явления формируются в результате действия физических и химических процессов [9-12] и проявляются при определенных сочетаниях технологических факторов добычи, геологической истории формирования полезного ископаемого и параметров физических воздействий [13-15].

Актуальность исследований физико-химических эффектов, проявляющихся в процессах горного производства, обусловлена необходимостью получения и развития новых фундаментальных знаний о природе и физических взаимодействиях внешних силовых полей с наноразмерными минеральными системами [16-18]. В данном случае исследования можно разделить на следующие основные направления: первое – с использованием квантовой механики и физической химии [19], второе традиционное – с применением статистической термодинамики и классической физики, геомеханики и др. [20]. Результаты исследований первого и второго направлений взаимно дополняют друг друга, формируя относительно полный сценарий подготовки и развития исследуемого физического процесса, например, газодинамического явления (процесса) для его физической интерпретации как это, например, представлено в [10-12].

В цитированных работах обсуждаются возможные механизмы и особенности физико-химических эффектов, причиной проявления которых является изменение состояния устойчивости химических связей в веществах различного агрегатного состояния. Нет необходимости утверждать насколько важными являются знания о природе проявления катастрофических событий в подземных выработках угольных шахт. К наиболее часто фиксируемым относятся выбросы угля, породы и газа, суфлярные выделения метана, спонтанное зажигание и взрывы угольной пыли, образование большого количества дополнительных вредных газов при взрывных работах и др. Разработка технических решений, направленных на предупреждение или подавление перечисленных явлений, относится непосредственно к решению актуальных задач безопасности в горной промышленности. С учетом физико-химических особенностей для каждого экспериментально наблюдаемого эффекта, не имеющего убедительной научной интерпретации, требуется формирование единого физического подхода к природе происходящего.

Из неразрешенных задач в области безопасности работ акцентируем внимание на физическом эффекте, который может инициировать снижение устойчивости и разрыв химической связи, т. е. инициировать начало развития химических процессов. Анализируя в целом предполагаемый физический сценарий снижения устойчивости вещества в результате влияния каких-либо внешних воздействий, мы выделили одну наиболее вероятную причину, которая может лежать в основе многих эффектов. Из практики хорошо известно, например, что в результате разрушения горных пород взрывом образуется дополнительное количество

вредных газов [21, 22], зависящих от химического и минерального состава пород [23], их физико-механических свойств, температуры и глубины залегания [24]. По данным экспериментальных исследований при взрывах одного вида взрывчатого вещества (ВВ) в различных породах и различных видов ВВ в одной породе, суммарное количество и состав ядовитых газов соответственно возрастают от 220 до ~1000% [23]. Установлено, таким образом, что на выход ядовитых газов горные породы оказывают большее влияние, чем химический состав ВВ [20].

Второй пример – выбросы угля и газа [4-6, 14, 15]. Ключевой вопрос заключается в происхождении большого количества газа, превышающее максимально возможное, которое способна «удерживать» микроструктура угля [23]. Поскольку речь идет о дополнительном количестве газа, то, по сути, речь идет о вероятных химических реакциях перехода органической массы угля в газ [9]. Третий пример – спонтанное воспламенение свежобразованной угольной пыли. Здесь очевидная роль поверхностных каталитически–окислительных реакций [24]. Из приведенных выше примеров следует, что разрыв старых химических связей и образование новых, вероятно, относятся к химическим реакциям наиболее значительным по массе вещества, участвующего в превращениях. Если в качестве катализаторов в реакциях участвуют электрические заряды [24, 18, 19], то реакции относятся к низкоэнергетическим; например, в физических процессах, характерных для подготовки и развития взрыва зарядов ВВ [25-27].

Цель исследований заключается в разработке физико-математической модели и методики оценки устойчивости химической связи в зависимости от величины напряженности электрического поля внешнего точечного заряда.

**Основные результаты исследований.** В данной работе предполагается, что развитие физико-химических процессов в горных породах обусловлено главным образом влиянием кинетических параметров, определяющих каталитические свойства пород, к которым относится поверхность и особенности ее функционального состояния [24]. Возможно также, что активность локальных зон на поверхности обусловлена присутствием электрических зарядов с плотностью распределения в соответствии с особенностями рельефа поверхности. В этом случае для течения реакций не требуется дополнительная стимуляция какими-либо внешними воздействиями [25].

Необходимость оценки устойчивости химической связи в поле внешнего электрического заряда стала очевидной в связи с изучением элементарного химического акта на твердых свежобразованных поверхностях, находящихся в газовой среде [23].

Представляя изучаемую систему как статистическую модель, предположим, что при сближении молекул СО (либо NO<sub>x</sub> и других) с поверхностью, имеющей электрические заряды (незавершенные и деформированные связи, дислокации, адсорбированные ионы и т.п.), часть из молекул попадает в поле заряда. При комнатной температуре напряженность электрического поля на расстоянии 10<sup>-9</sup> м от одновалентного иона составляет ~ 1,5·10<sup>7</sup> В/см. Минимальная энергия, которую необходимо сообщить например молекуле СО для разрыва ее связей,

соответствует реакции, при которой образуются нейтральные атомы углерода и кислорода.

Для решения данной задачи использовали квантово-механические задачи и результаты работ [19, 24, 28, 29]. В целом предлагаемый метод расчета отличается от известного метода построения одноэлектронных молекулярных орбиталей в форме линейных комбинаций атомных функций (метод МО ЛКАО) тем, что за базис принимаются многоцентровые функции в эллипсоидальных координатах, а все физические функционалы вычисляются аналитически. Построены замкнутые выражения для функций Грина позволяют решать квантово-механическую задачу с возмущениями. Метод же МО ЛКАО не дает возможности проводить подобные расчеты, поскольку возникает необходимость в определении числовых коэффициентов в каждой точке пространства. Трудности возникают также при подсчете энергии электрон-электронного взаимодействия.

Одно из преимуществ квантово-механических расчетов заключается в том, что для химических связей энергетические термы легко рассчитываются как в основном, так и в возбужденном состоянии. При этом появляется возможность следить за динамикой процесса разрушения устойчивой химической связи и ее постепенным «разрыхлением» до момента диссоциации [19, 24].

В расчетах использовали задачу, в которой на отдельно выбранную химическую связь действует некоторое возмущение  $W(\tau)$ . Тогда уравнение Шредингера и гамильтониан взаимодействия трех частиц будет иметь следующий вид [19]:

$$H\hat{O} = i\hbar \frac{\partial \hat{O}}{\partial t}; \quad H = H_0 + W(\tau); \quad (1)$$

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2M_t} \Delta \vec{R} - \frac{\hbar^2}{2M} \Delta \vec{R} - \frac{\hbar^2}{2M} \Delta \vec{r} + \frac{Z_1 Z_2}{R} - \frac{Z_1 Z_2}{r_1} - \frac{Z_2 Z_3}{r_2}, \quad (2)$$

где  $M_t$  – масса трех взаимодействующих частиц;  $M = M_1 M_2 / (M_1 + M_2)$ ;  $M_1$  и  $M_2$  – массы ядер молекулы;  $Z_1$  и  $Z_2$  – эффективные заряды,  $Z_2 \geq Z_1$ ;  $Z_3$  – заряд третьего кулоновского центра. Если считать, что  $M_3 \ll (M_1; M_2)$ . После отделения движения центра трех частиц уравнение Шредингера приобретает вид:

$$H'_0 \hat{O}(\vec{R}, \vec{r}) = E^n \hat{O}(\vec{R}, \vec{r}), \quad (3)$$

где  $E^n$  – полная энергия трех тел в системе центра инерции, а гамильтониан  $H_0$  в единицах  $\hbar = Z_3 = m = 1$  выражается следующим образом:

$$H = -\frac{1}{2I} \Delta \vec{R} + \frac{Z_1 Z_2}{R} + H_e; \quad (4)$$

$$H_e \varphi = \left\{ -\frac{1}{2} \Delta \vec{r} - \frac{Z_1}{r_1} - \frac{Z_2}{r_2} \right\} \varphi. \quad (5)$$

Уравнение (5) можно переписать в эллипсоидальных координатах, что позволит разделить переменные и привести к системе трех обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка:

$$\left[ \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \Lambda^2 \right] \hat{O}(\phi) = 0; \quad (6)$$

$$\left[ \frac{\partial}{\partial \mu} (1 - \mu^2) \frac{\partial}{\partial \mu} - \frac{\lambda^2}{1 - \mu^2} - \mu^2 \varepsilon + \mu Z^- - A \right] Y(\mu) = 0; \quad (7)$$

$$\left[ \frac{\partial}{\partial \lambda} (\lambda^2 - 1) \frac{\partial}{\partial \lambda} - \frac{\lambda^2}{\lambda^2 - 1} + \lambda^2 \varepsilon + \lambda Z^+ + A \right] X(\lambda) = 0, \quad (8)$$

где  $A$  – постоянная разделения;  $|\Lambda| = 0, 1, 2, \dots$ ;  $\varepsilon = ER^2/2$ ;  $\varphi = X(\lambda)Y(\mu)\Phi(\phi)$ ;  $Z^{(\pm)} = (r_a \pm r_\varepsilon)R$ ;  $\lambda = (r_a + r_\varepsilon)/R$ ;  $1 \leq \lambda \leq \infty$ ;  $\mu = (r_a - r_\varepsilon)/R$ ;  $-1 \leq \mu \leq 1$ ;  $\Phi(\phi) = \exp(i\lambda\phi)$ .

Анализ, проведенный для уравнений (7) и (8), позволил выделить модельную задачу, которой соответствует уравнение:

$$\left\{ \frac{\partial^2}{\partial t^2} + \frac{1 - \lambda^2}{4t^2} + \frac{c}{t} + \frac{\partial}{\partial \mu} (1 - \mu^2) \frac{\partial}{\partial \mu} - \frac{\lambda^2}{1 - \mu^2} + \frac{\partial}{\partial \phi^2} + \lambda^2 + n(n+1) \right\} f(t)Y(\mu)\hat{O}(\phi) = 0, \quad (9)$$

где  $c = (\lambda^2 - 1)/4 + A/2 + \varepsilon/2 + Z^+/r$ .

Функция Грина для оператора в уравнении (9) построена в работе [25]. Решение модельной задачи (9) при определенных квантовых числах  $k, n, \lambda$  выражается через функции Уиттекера и через присоединенные функции Лежандра. Тогда волновая функция системы с использованием функции Грина примет вид:

$$\varphi_{k,\Lambda,n}(\lambda, \mu, \varphi) = \varphi_{k,\Lambda,n}^0(\lambda, \mu, \varphi) + \int G \cdot W(t', \mu', \varphi') \varphi_{k,\Lambda,n}(t', \mu', \varphi') d\tau \quad (10)$$

где  $\tilde{W} = W - \frac{1}{t+2} \left( \frac{\lambda^2 - 1}{4} + \frac{A}{2} + \frac{\varepsilon}{2} - \frac{Z^+}{2} \right) + \frac{1 - \lambda^2}{4(t+2)^2}$ .

Развитый здесь формализм ранее был применен в [24,25] для аналитического расчета молекул водорода  $H_2$  и  $H_2^+$ , LiH, химических связей в твердой фазе, например TiN и TiC.

Энергии связей, соответствующие квантовым числам  $k=1/2$ ;  $\lambda=n=0$ ;  $k=3/2$ ;  $\lambda=n=0$  получали из выражения:

$$E_{k,\Lambda,n} = \frac{\langle \varphi_{k,\Lambda,n} | H_0 | \varphi_{k,\Lambda,n}^* \rangle}{\langle \varphi_{k,\Lambda,n} | \varphi_{k,\Lambda,n}^* \rangle}. \quad (11)$$

Для нахождения колебательного спектра химической связи молекулы CO использовано уравнение Шредингера для потенциала Морса:

$$\frac{d^2 \varphi}{dx^2} + \frac{2MR_0^2}{\hbar^2} \left[ E - A e^{-2\alpha x} + 2A e^{-\alpha x} \right] \varphi = 0, \quad (12)$$

здесь  $2A e^{-\alpha x} - 2A e^{-2\alpha x} = V(x)$  – 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 из условий пересечения модельной и реальной потенциальных кривых с осью  $R$ .

При построении зависимости  $E(R)$  представляет интерес тот спектр энергии взаимодействия молекулы CO, который соответствует дискретной его части, т.е. при значениях  $E < 0$ . Если преобразовать уравнение (12) к виду:

$$\frac{d^2\varphi}{dt^2} + \frac{1}{t} \frac{d\varphi}{dt} + \left( -\frac{1}{4} + \frac{n+s+1/2}{t} - \frac{s^2}{t^2} \right) \varphi = 0.$$

Вводим обозначения  $n+s+1/2 = \sqrt{2MR_0^2 A / \alpha \hbar}$ ,  $s^2 = -2R_0ME / \alpha^2 \varphi^2$  и производя замену  $\varphi(t) = t^{-1/2} \phi(t)$ , получим уравнение Уиттекера для потенциала Морса:

$$\frac{d^2\phi}{dt^2} + \left( \frac{1}{4} + \frac{n+s+1/2}{t} + \frac{1/4-s^2}{t^2} \right) \phi = 0.$$

Поскольку для связанных состояний волновая функция на бесконечности должна стремиться к нулю при  $n = 0, 1, 2, \dots$ , то и расчет энергии колебательного спектра молекулы следует производить на основании выражения:

$$E_n^M = -A \left[ 1 - \alpha \hbar \left( n + \frac{1}{2} \right) / \sqrt{2AMR_0^2} \right]^2.$$

В результате расчетов получены численные значения электронных состояний молекул как в невозмущенном состоянии, так и в присутствии внешних зарядов разного знака и величины. Для исследуемых систем (табл.) расчёты проводились при температуре 0 К.

Таблица

Сравнительные характеристики молекул

Двухатомная молекула	Теоретические значения		Экспериментальные значения [30]	
	R, а.е.	E, а.е.	R, а.е.	E, а.е.
CO	2,169	-0,383	2,133	-0,395
O <sub>2</sub>	2,119	-0,178	2,1123	-0,1905
N <sub>2</sub>	2,068	-0,3607	2,1038	-0,3607
LiH	2,9172	-0,078	2,901	-0,0918
H <sub>2</sub>	1,525	-0,0155	1,445	-0,166
Li <sub>2</sub>	5,0626	-0,045	5,130	-0,0409
HCl	2,5394	-0,154	2,447	-0,1645
CH	2,171	0,1522	2,153	0,1575
OH	1,882	0,1765	1,865	0,1765
C <sub>2</sub>	2,974	0,1302	2,967	0,1319
FeS	2,052	0,1254	2,073	0,1312
FeSi	2,124	0,1561	2,195	0,1123

**Обсуждение результатов.** Квантово-механические расчеты показывают, что вероятность разрыва химических связей любых двухатомных молекул увеличивается либо с уменьшением расстояния молекулы от иона, либо с

увеличением валентности иона при всех прочих равных условиях, подтверждая результаты вычислений [19, 27]. Устойчивость молекулы определяется функцией  $E(Z^{\pm}; R)$  при условии влияния поля заряда. Сильным активационным фактором, увеличивающим вероятность разрыва химической связи, является температура [18]. Так, например, разрыв связи молекулы CO в поле двухвалентного иона происходит при комнатной температуре. Вероятность разрыва связи при увеличении температуры при всех прочих равных условиях существенно возрастает. Близкое по характеру влияние оказывает увеличение давления.

Поскольку реальная температура высокоэнергетической системы «взрывчатое вещество – продукты взрыва» колеблется от 300 до 3000 К, то не трудно понять, что функции  $E(Z^{\pm}; R)$  не будут иметь минимума. И если присутствие иона с зарядом  $(-3)$  способно сильно уменьшить энергию разрыва химической связи (на примере молекулы CO), переводя её в нестабильное состояние, то при начальной температуре, соответствующей некоторому значению из указанного диапазона, следует ожидать разрыв химической связи этой молекулы. Увеличение температуры приведет к тому, что молекулы CO окажутся способными к диссоциации на таком расстоянии от точечного заряда, которое в несколько раз превысит характерные межатомные расстояния в твердом теле.

Использование в качестве приближения к электронному терму молекулы потенциала Морса приводит к простому решению задачи поиска колебательного спектра молекулы. На рис. 1 и рис. 2 показаны результаты расчетов колебательных уровней молекулы CO, находящейся в состоянии  $(1/2, 0, 0)$  и  $(3/2, 0, 0)$ .

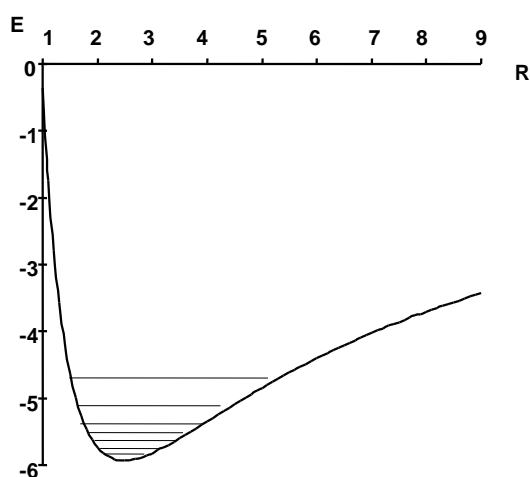


Рис. 1. Колебательные уровни молекулы CO в состоянии 1/2

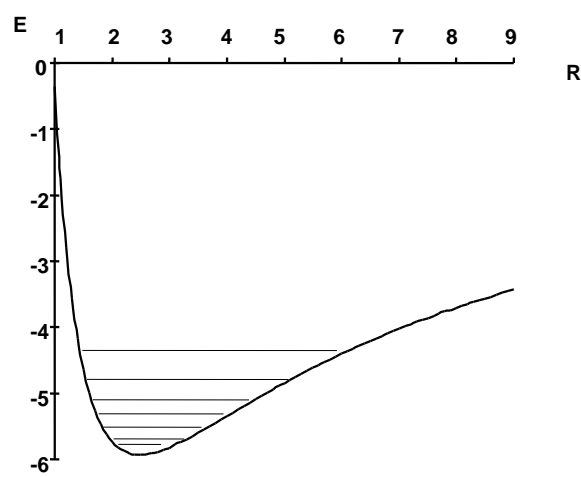


Рис. 2. Колебательные уровни молекулы CO в состоянии 3/2

В качестве примера показаны результаты расчета основных электронных термов молекул  $H_2$  (рис. 3, а),  $HCl$  (рис. 3, б),  $N_2$  и  $CO$  (рис. 3, в),  $FeSi$  и  $FeS$

(рис. 3, г). Корректность квантово-механической модели подтверждается данными экспериментальных значений межатомных расстояний и соответствующих энергий химической связи [30].

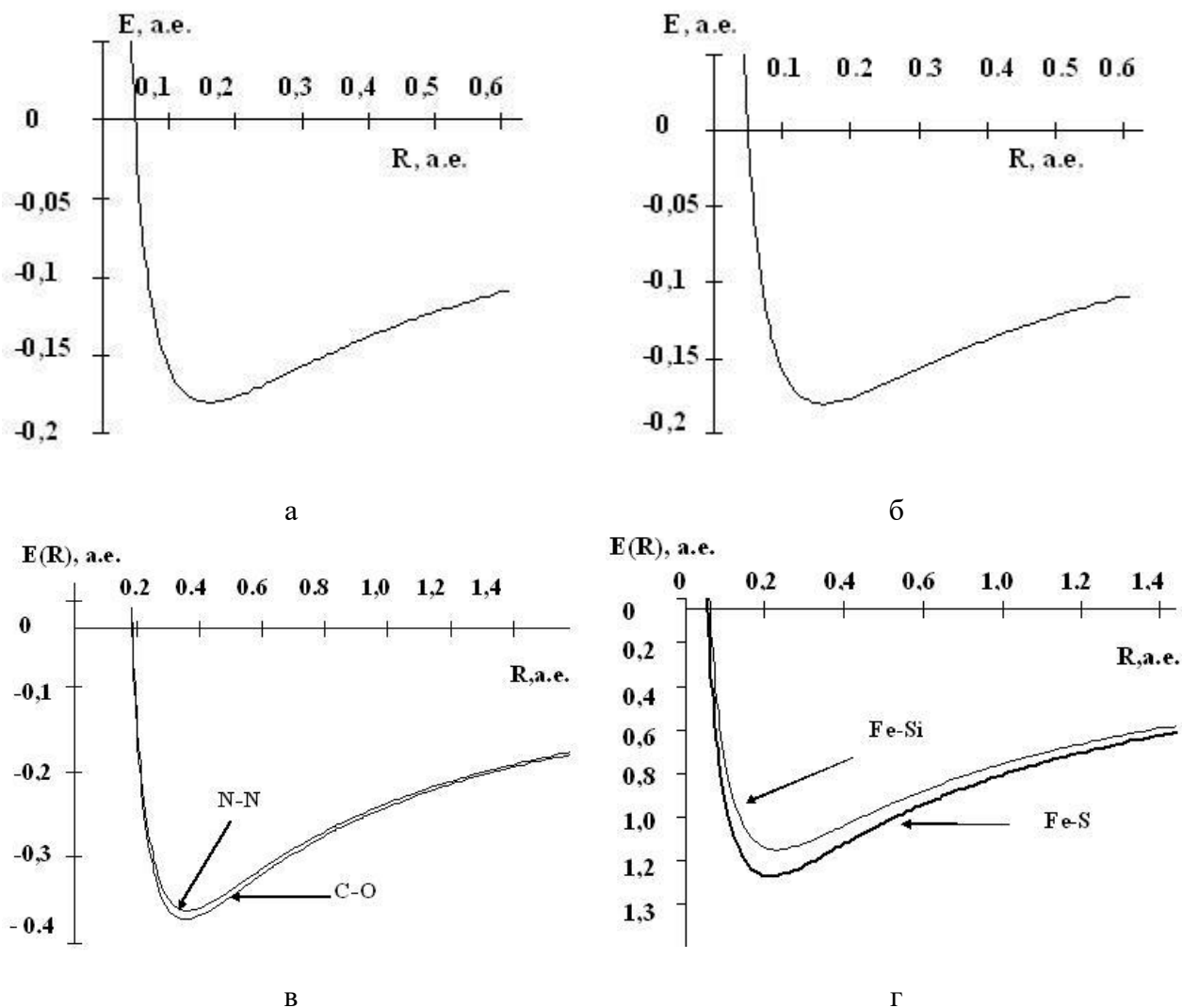


Рис. 3. Электронные термы молекул  $H_2$  (а),  $HCl$  (б),  $N_2$  и  $CO$  (в) и  $FeSi$  и  $FeS$  (г)

Среди различных молекул энергия разрыва связи ( $D_0$ ) молекулы  $CO$  характеризуется наибольшим значением  $\sim 1074$  кДж/моль; для  $CO^+$  и  $CO_2$  эта величина равна соответственно  $\sim 810$  и  $\sim 540$  кДж/моль. Для таких окислов азота как  $NO$ ,  $NO^+$  и  $NO^-$  энергия разрыва связей будет составлять  $\sim 628$ ,  $\sim 1045$  и  $\sim 500$  кДж/моль соответственно [30]. Приведенные значения энергий разрыва связи токсичных молекул, образующихся в продуктах детонации взрывчатых веществ (ВВ), свидетельствуют о том, что с уменьшением параметра  $D_0$  вероятность разрушения молекул возрастает; сценарий изменения динамики связи (изменения устойчивого состояния) качественно не меняется и полностью соответствует динамике связи  $CO$  в поле точечного электрического заряда [19, 27, 31].

Состояние поверхности как кинетический параметр является исключительно индивидуальным свойством кристаллов (твердых тел вообще),



включающим не только энергетическую составляющую, но и способность к дальнедействующей передаче структурной информации. На основании этого можно предположить, что формирование (либо разрушение) органических и неорганических фаз будет обусловлено влиянием физико-химического состояния поверхности. На различных поверхностях возможно зарождение новых фаз различных по составу, агрегатному состоянию и химической активности [19, 27, 31].,

**Заключение.** Квантово-механическая модель расчета электронных термов молекул позволяет решать задачи, связанные с определением параметров молекул в условиях воздействия физических полей различной структуры на рассматриваемую систему. Модель апробирована на некоторых двухатомных молекулах. Расхождение экспериментальных данных с результатами расчетов не превышает 10%, что свидетельствует о вполне корректной интерпретации получаемых результатов.

Модель может быть использована для объяснения причин, вызывающих газодинамические явления в подземных выработках угольных шахт, в моделировании самовозгорания терриконов, самовоспламенения пылевоздушной смеси в угольных шахтах, в исследованиях состояния устойчивости наноструктурных компонентов угля в условиях физических воздействий, при теоретическом конструировании новых соединений и структур в области наноматериаловедения и нанотехнологий. При соответствующей модернизации кроме качественной оценки модель дает количественную оценку устойчивости химических связей при тех или иных меняющихся условиях.

Перспективы развития производства ВВ с новым комплексом характеристик, очевидно, будут связаны с разработкой прецизионных технологий, способных эффективно управлять их структурой и физико-химическими свойствами.

В процессе взрывного разрушения горных пород образуется сеть радиальных трещин, в которые под давлением проникают продукты взрыва. Под действием механических нагрузок свежесформированные поверхности трещин в первую очередь вступают в реакцию с газами взрыва. Эти процессы протекают за времена  $\leq 10^{-4}$  с. Механические парамагнитные центры (например радикалы), обладая высокой реакционной способностью, реагируют с молекулами газа, образуя новые соединения.

#### Перечень ссылок

1. Zhi, S., & Elsworth, D. (2016). The role of gas desorption on gas outbursts in underground mining of coal. *Geomech Geophys Geo-energ Geo-resour*, 151-171.  
doi:10.1007/s40948-016-0026-2
2. Sobolev, V.V., Ustimenko, E.B., Nalisko, N.N., & Kovalenko, I.L. (2018). The macrokinetics parameters of the hydrocarbons combustion in the numerical calculation of accidental explosions in mines. *Naukovyi Visnyk Natsionalnoho Hirnychoho Universytetu*, №1, 89-98.  
doi:10.29202/nvngu/2018-1/8
3. Nalisko, M., Sobolev, V., Rudakov, D., & Bilan, N. (2019). Assessing safety conditions in underground excavations after a methane-air mixture explosion. *E3S Web of Conferences*, 123.  
doi:10.1051/e3sconf/201912301008

4. Rudakov, D., & Sobolev, V. (2019). A Mathematical Model of Gas Flow during Coal Outburst Initiation. *International Journal of Mining Science and Technology*, Available online, 791-796. doi:10.1016/j.ijmst.2019.02.002
5. Chen, Z.Y., Jin, B., & Wu, C.F. (2014). Study on catastrophe of coal and gas outburst in coal tunneling face. *J Chem Pharm Res*, 6 (6), 419-425.
6. Fan, C.J., Li, S., Luo, M.K., Du, W.Z., & Yang, Z.H. (2017). Coal and gas outburst dynamic system. *Int J Mining Sci Technol*, 27 (1), pp. 49-55. doi:10.1016/j.ijmst.2016.11.003
7. Khomenko, O., Sudakov, A., Malanchuk, Z., & Malanchuk, Ye. (2017). Principles of rock pressure energy usage during underground mining of deposits. *Naukovyi Visnyk Natsionalnoho Hirnychoho Universytetu*, (2), 35-43.
8. Saik, P.B., Dychkovskiy, R.O., Lozynskiy, V.H., Malanchuk, Z.R., & Malanchuk, Ye.Z. (2016). Revisiting the underground gasification of coal reserves from contiguous seams. *Naukovyi Visnyk Natsionalnoho Hirnychoho Universytetu*, (6), 60-66.
9. Соболев, В.В. (2003). К вопросу о природе образования выбросоопасных углей. *Сборник научных трудов НГУ*. Днепропетровск: РИК НГУ, 1(17), 374-383.
10. Соболев, В.В. (2009). Предполагаемые условия, причины и параметры образования выбросоопасных углей. *Форум гірників – 2009. Матеріали міжнар. конф. "Підземні катастрофи: моделі, прогноз, запобігання"*. *Сборник научных трудов НГУ*. Днепропетровск: РИК НГУ, 169-179.
11. Pivnyak, G.G., Sobolev, V.V., & Filippov, A.O. (2012). Phase transformations in bituminous coals under the influence of weak electric and magnetic fields. *Naukovyi Visnyk Natsionalnoho Hirnychoho Universytetu*, 5, 43-49.
12. Sobolev, V., Bilan, N., & Samovik, D. (2013). Magnetic stimulation of transformations in coal. *Mining of Mineral Deposits*. Leiden: CRC Press/Balkema, 221-225. doi:10.1201/b16354-40
13. Петухов, И.И., & Линьков, А.М. (1983). *Механика горных ударов и выбросов*. Москва: Недра.
14. Алексеев, А.Д. (2010). *Физика угля и горных процессов*. Киев: Наукова Думка.
15. Булат, А.Ф., Лукинов, В.В., Пимоненко, Л.И., Безручко, К.А., & Бурчак, А.В. (2012). *Геологические основы и методы прогноза выбросоопасности угля, пород и газа*. Монография. Днепропетровск: Монолит.
16. Соболев, В.В. (1998). Фундаментальні дослідження в області взаємодії конденсованих систем з фізичними полями. *Наук. вісник Націон. гірн. академії України*, 1, 106-109.
17. Sobolev, V.V., Taran, Y.N., & Gubenko, S.I. (1997). Shock wave use for diamond synthesis. *Journal De Physique. IV : JP*, 7(3), 73-75. doi:10.1051/jp4:1997315
18. Sobolev, V.V., Bilan, N.V., & Khalimendik, A.V. (2017). On formation of electrically conductive phases under electrothermal activation of ferruginous carbonate. *Naukovyi Visnyk Natsionalnoho Hirnychoho Universytetu*, 4, 53-60.
19. Соболев, В.В. (2010). Закономерности изменения энергии химической связи в поле точечного заряда. *Доповіді НАН України*, 4, 88-95.
20. Соболев, В.В., Чернай, А.В., Зберовский, В.В., Поляшов, А.С., & Филиппов, А.О. (2014). *Физическая механика выбросоопасных углей*. В. Запорожье: Привоз Принт.
21. Светлов, Б.Я. (1960). Ядовитые газы при взрывных работах. *Взрывное дело*, 45/2. Москва: Госгортехиздат, 101-117.
22. Худяков, М.Я. (1973). Определение количества ядовитых газов при взрывных работах в шахтах. *Техника безопасности, охрана труда и горноспасательное дело*, 8, 24-25.
23. Росси, Б.Д. (1966). *Ядовитые газы при подземных взрывных работах*. Москва: Недра.

24. Sobolev, V V., Bilan, N.V., Baskevich, A.S., & Stefanovich, L.I. (2018). Electrical charges as catalysts of chemical reactions on a solid surface. *Naukovyi Visnyk Natsionalnoho Hirnychoho Universytetu*, №4, 50-58.  
doi:10.29202/nvngu/2018-4/7
25. Кук, М.А. (1980). *Наука о промышленных взрывчатых веществах*. Пер с англ. Под ред. Г.П. Демидюка и Н.С. Бахаревича. Москва: Недра.
26. Дубнов, Л.В., Бахаревич, Н.С., & Романов, А.И. (1988). *Промышленные взрывчатые вещества*. 3-у изд., перераб. и доп., Москва: Недра.
27. Соболев, В.В., Баскевич, О.С., & Вареник, Є.О. (2015). *Електростимульовані хімічні реакції в атмосфері вугільних шахт*. Харків: Видавництво «Технологічний центр».
28. Ярковой, Г.О., Заславская, Л.И., & Россихин, В.В. (1977). *Аналитический расчет потенциальных кривых двухатомных молекул*. Киев. (Препр./ АН УССР. Ин-т теор. физики).
29. Ярковой, Г.О. (1975). *Функция Грина для задачи электрона в поле двух кулоновских центров*. Киев. (Препр./ АН УССР. Ин-т теор. физики).
30. Гурвич, Л.В., Караченцев, Г.В., Кондратьев, В.Н., Лебедев, Ю.А. и др. (1974). *Энергия разрыва химических связей. Потенциалы ионизации и сродство к электрону*, Москва: Наука.
31. Соболев, В.В., Ярковой, Г.О., & Чернай, А.В. (1994). *Синтез алмаза. III. Теоретические исследования с применением квантовомеханических методов расчета*. Минералогический журнал, 5/6, 23-30.

#### АНОТАЦІЯ

**Мета** досліджень полягає у використанні фізико-математичної моделі та методики оцінки стану стійкості хімічного зв'язку в залежності від величини напруженості електричного поля зовнішнього точкового заряду.

**Методики.** Робота виконана відповідно до рекомендацій методології проведення теоретичних досліджень. Використано квантово-хімічні закономірності, що описують кулонівських взаємодій атомів.

**Результати.** Пропонується гіпотеза про можливе фізико-хімічному механізмі утворення додаткових шкідливих газів при руйнуванні гірських порід вибухом.

**Наукова новизна.** Отримав розвиток метод чисельної оцінки енергії хімічного зв'язку в залежності від відстані зв'язку до точкового заряду - третього кулонівського центру. Квантово-механічна модель розрахунку електронних термів молекул дозволяє вирішувати завдання, пов'язані з визначенням параметрів молекул в умовах впливу різних фізичних полів на розглянуту систему. Модель апробована на деяких двоатомних молекулах. Розбіжність експериментальних даних з результатами розрахунків не перевищує 10%, що свідчить про цілком коректної інтерпретації отриманих результатів.

**Практична цінність.** Модель може бути використана в області дослідження причин, що викликають газодинамічні явища в підземних виробках вугільних шахт, в моделюванні самозаймання териконів, в дослідженнях стану стійкості наноструктурних компонентів вугілля в умовах фізичних впливів, при теоретичному конструюванні нових з'єднань і структур в області наноматеріалознавства і нанотехнологій. При відповідній модернізації крім якісної оцінки модель дає кількісну оцінку стійкості хімічних зв'язків при тих чи інших умовах, що змінюються.

**Ключові слова:** хімічний акт, кулонівський центр, розрив зв'язку, трехцентровая завдання.

---

**ABSTRACT**

**Objective** of the research is to apply a physico-mathematical model and methodology of evaluating the conditions of chemical bond stability depending on the value of the electric field intensity of the external point charge.

**Methodologies.** The research is carried out according to the recommendations of the research practice methodology. The quantum-chemical regularities describing Coulomb interactions between atoms have been applied.

**Findings.** A hypothesis on possible physicochemical mechanism of the formation of additional harmful gases, while rock breaking by blasting, is proposed.

**Originality.** A method of numerical evaluation of the chemical bond energy depending on the distance to the point charge – third Coulomb centre has been worked out. A quantum-mechanical model of the calculation of the electron terms of molecules helps solve the problems dealing with the determination of the molecule parameters under conditions of the effect of different physical fields on the system under consideration. The model is tested in terms of some diatomic molecules. Disagreement of the experimental data with the calculation results is not more than 10% demonstrating rather correct interpretation of the obtained results.

**Practical implications.** The model may be used while studying the causes of gas-dynamic phenomena in the underground workings of coal mines; simulating self-ignition of the waste piles; analyzing the condition of stability of nanostructural coal components in terms of physical effects; and theoretical designing of new compounds and structures in the field of nanomaterial engineering and nanotechnologies. In terms of proper modernization, the model proposes not only qualitative but also quantitative evaluation of the chemical bond stability in terms of different changing conditions

**Keywords:** *chemical act, coulomb centre, bond breaking, three-centre problem.*