*Цифровой идентификатор объекта* – DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/21-68-11-28

УДК 544.144.7: 544.145. Поступила в редакцию 9 августа 2021 г.

*Светлой памяти Михаила Яковлева – ветерана ВОВ, учёного-физика,*

*преподававшего в СамГТУ и СамГУПС, посвящается*

**О связи энергий диссоциации в двухатомных системах**

**с участием щелочных металлов с эффективными**

**размерами исходных атомов**

© **Яковлев**1\* **Виктор Михайлович** и **Бурчаков**2+ **Александр Владимирович**

1*Самарский государственный университет путей сообщения. ул. Свободы, 2В.*

*г. Самара, 443066. Россия.*

2*Самарский государственный технический университет. ул. Молодогвардейская, 244.  
 г. Самара, 443100. Россия. E-mail: turnik27@yandex.ru*

*\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_*

\*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

***Ключевые слова:*** энергия диссоциации, двухатомные соединения щелочных металлов, эмпирические атомные радиусы, аппроксимация связи.

**Аннотация**

# Проведённый анализ показывает, что в количественном отношении известные к настоящему времени способы формализации устойчивости химических связей, даже в случаях простейших двухатомных соединений, недостаточно эффективны. В настоящей работе величины энергий диссоциации (ЭД) двухатомных молекул, содержащих щелочные металлы (ЩМ), рассмотрены в аспекте зависимости прочности связей от эмпирических радиусов исходных атомов, как опорных дескрипторов. На примерах фторидов, гидридов и гомоядерных аддуктов ЩМ дается трактовка ЭД на основе зависимости, описываемой простой степенной функцией от значений радиусов выделенного вида. Эти примеры охватывают случаи сильно и умеренно полярных, а также чисто ковалентных связей. В такой аппроксимации коэффициент пропорциональности и отрицательный по знаку показатель степени специфичны в отношении типа соединения. В отличие от гомонуклеарных молекул ЩМ, в случае гетероатомных систем в указанной процедуре следует также учитывать усиливающий интенсивность связи размерный фактор, роль которого, однако, сравнительно невелика даже при максимальном различии в размерах сочленяемых атомов. Это относится и к соединениям с предельно высокой степенью ионности, которыми являются фториды ЩМ. Дано объяснение определённого изменения характера описания ЭД при переходе к трактовке гидридов ЩМ. При этом отмечено сходство в подходах при рассмотрении гидридов и гомоатомных димеров ЩМ. Предлагаемая эмпирическая схема оценки прочности двухатомных молекул удовлетворительно согласуется с экспериментальными справочными данными и квантово-химическими расчётами соответствующих энергий диссоциации. Сформулирован вывод о продуктивности пред-ложенного однопараметрического подхода и его перспективности в приложении к бинарным атомным системам других типов.