

Абсолютное значение энергии диссоциации химической связи как маркер направления химической реакции

© Якубов Адель Ренатович

Научный фонд имени А.М. Бутлерова. E-mail: iaoubov@mail.ru

Ключевые слова: энергия химической связи, длина химической связи, катионы сульфидов переходных металлов.

Аннотация

Используя фундаментальный закон природы, описывающий зависимость энергии диссоциации химической связи от её длины удалось преодолеть отмеченные ранее трудности в расчёте $D_0(M^+-S)$, где $M = Sc, Ti, V, Y, Zr, Nb$. Рекомендованные экспериментальные энергии диссоциации связи $D_0(Sc^+-S) = 4.97 \pm 0.05$ эВ, $D_0(Ti^+-S) = 4.74 \pm 0.07$ эВ, $D_0(V^+-S) = 3.78 \pm 0.10$ эВ, $D_0(Y^+-S) = 5.49 \pm 0.18$ эВ, $D_0(Zr^+-S) = 5.69 \pm 0.10$ эВ, $D_0(Nb^+-S) = 5.20 \pm 0.21$ эВ. Расчёты, сделанные в настоящей статье, дают: 4.967 эВ, 4.72 эВ, 3.772 эВ, 5.505 эВ, 5.694 эВ, 5.209 эВ соответственно. Кроме рекомендованных значений $D_0(M^+-S)$, где $M = Sc, Ti, V, Y, Zr, Nb$ имеются и другие экспериментально наблюдаемые значения энергии диссоциации сульфидов переходных металлов, наблюдавшиеся в реакциях этих сульфидов с кислород содержащими субстратами, такими как COS, CO и CO₂. Существенной особенностью этих реакций было то, что для различных направлений реакций наблюдались различные значения энергии диссоциации сульфидной связи реагента. Все наблюдаемые энергии диссоциации сульфидов переходных металлов MS^+ , где $M =$ скандий, титан, ванадий, иттрий, цирконий и ниобий были рассчитаны с точностью, соответствующей точности расчётов для рекомендованных значений энергии диссоциации. В расчётах использовались длины связей, рассчитанные для различных электронных конфигураций. Это открывает возможности по проведению корреляции между электронными конфигурациями реагента и направлением реакции. Понимание роли отдельных электронных состояний в химических реакциях представляет не только очевидный фундаментальный интерес, но также может помочь в решении прикладных задач по разработке и оптимизации селективных катализаторов промышленных процессов.

Выходные данные для цитирования русскоязычной печатной версии статьи:

Якубов А.Р. Абсолютное значение энергии диссоциации химической связи как маркер направления химической реакции. *Бутлеровские сообщения*. 2023. Т.73. №1. С.20-28. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/23-73-1-20

Выходные данные для цитирования русскоязычной электронной версии статьи:

Якубов А.Р. Абсолютное значение энергии диссоциации химической связи как маркер направления химической реакции. *Бутлеровские сообщения А*. 2023. Vol.5. No.1. Id.2. DOI: 10.37952/ROI-jbc-RA/23-5-1-2.