

Оценки энергий диссоциации двухатомных галидов щелочных элементов на примерах фторидов франция и экафранция

© Яковлев^{1*} Виктор Михайлович, Бурчаков²⁺ Александр Владимирович,
Будко Константин Алексеевич

¹ Научный фонд имени А.М. Бутлерова. E-mail: butlerov@mail.ru

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

³ Самарский государственный университет путей сообщения. ул. Свободы, 2В.
г. Самара, 443066. Россия. E-mail: kostya.budko.03@mail.ru

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: двухатомные соединения ионного типа, фториды щелочных элементов, аддукты франция и экафранция, энергии диссоциации, экспресс-оценки, оптимизация выбора рациональной процедуры аппроксимации.

Аннотация

В ракурсе внимания в данном аналитическом обозрении – результативность опубликованных методик вычислений энергий межатомной связи в монофторидах щелочных металлов. Среди них, двухатомные молекулы фторидов франция (*Fr*, *E87*) и пока не синтезированного сверхтяжёлого экафранция (*Uue*, *E119*) – металлов подгруппы щелочных элементов – с начала текущего века всё активней изучаются в теоретических исследованиях как модельные примеры реализации типично ионных химических связей с несколько усиленным ковалентным характером (вследствие существенного вклада релятивистского эффекта). Понимание того, как влияют имманентные характеристики атомов указанных металлов и фтора на прочность межатомного сцепления в гетеронуклеарных связях димерных молекул названных галидов важно в плане решения не только фундаментальных задач, но и в практическом аспекте прогнозирования числовых значений энергий атомизации аддуктов, включающих трансактинидные химические элементы. В связи с иногда значительными расхождениями в совокупности известных результатов привлечения классических схем вычисления и соответствующих квантово-химических расчётов с опытными энергиями разрыва на нейтральные атомы монофторидов более лёгких щелочных металлов, в настоящей работе рассмотрены возможности получения адекватных экспресс-оценок соответствующих энергий диссоциации, как важнейших характеристик устойчивости соединений, исходя из электроотрицательностей, эмпирических атомных радиусов и главных квантовых чисел наружных оболочек элементов – в качестве опорных дескрипторов. При этом сопоставляются между собой по эффективности три концептуально различающихся между собой подхода, опирающиеся на характеристики положения элементов в Периодической системе или – в качестве электронной атрибуции – на потенциал ионизации атома щелочного элемента. Попутно анализируется и проясняется роль наиболее весомых факторов и отвечающих им вкладов в энергиях гомолитического разрыва связей рассмотренных бинарных систем.

Содержание

Введение

1. Выражения энергии диссоциации
2. Вычисления ЭД в случае ФЩЭ, образованных начальными пятью щелочными металлами
3. Использование эмпирических атомных радиусов
4. Использование главных квантовых чисел внешних оболочек атомов
5. Оценки энергии атомизации монофторида франция
6. Прогноз энергии диссоциации монофторида экафранция и обсуждение соответствия полученных оценок расчётным спектроскопическим данным

Выходные данные для цитирования русскоязычной печатной версии статьи:

Яковлев В.М., Бурчаков А.В., Будко К.А. Оценки энергий диссоциации двухатомных галидов щелочных элементов на примерах фторидов франция и экафранция. *Бутлеровские сообщения*. 2023. Т.73. №3. С.54-69. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/23-73-3-54

Выходные данные для цитирования русскоязычной электронной версии статьи:

Яковлев В.М., Бурчаков А.В., Будко К.А. Оценки энергий диссоциации двухатомных галидов щелочных элементов на примерах фторидов франция и экафранция. *Бутлеровские сообщения В*. 2023. Vol.5. No.1. Id.9. DOI: 10.37952/ROI-jbc-RB/23-5-1-9.