

## Энергии диссоциации фторидов щелочных металлов

© Якубов Адель Ренатович

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

**Ключевые слова:** энергия диссоциации химических связей, щелочные фториды, потенциал Юкавы, обратное донорство, теория резонанса.

### Аннотация

Разность электроотрицательностей щелочных металлов и фтора такова, что имеет место полный перенос электрона с металла на фтор и происходит формирование химической связи по Косселю (ионная связь). Однако энергия связи в данном случае не описывается полноценно законом Кулона. В литературе имеется предположение, что для фторида лития и фторидов лантаноидов характерно наличие донорно-акцепторного взаимодействия между фтором (донор) и металлом (акцептор), так называемое обратное донорство (backdonation). Однако доказательств этому представлено не было. Направление смещения электронов в данном случае аналогично индукционному и мезомерному эффектам. В представленных в настоящей статье уравнениях содержится только один потенциал ионизации – потенциал ионизации донора, что позволяет выяснить имеет ли место обратное донорство или нет.

Проанализированы все имеющиеся на сегодня экспериментальные данные энергий диссоциации и длин связей фторидов щелочных металлов. Для анализа использовался закон, связывающий энергию и длину химической связи. Как показал анализ экспериментальных данных с использованием авторской методологии, в образовании связи M-F, где M = Li, Na, K, Rb, Cs, в изолированных молекулах основной вклад даёт вторичное донорно-акцепторное взаимодействие, обусловленное перекрытием занятой *p*-орбитали фтора и вакантной *p*-орбитали металла (обратное донорство), так называемая « $\pi$ -связь». Эти « $\pi$ -связи» могут находиться как в вырожденных, так и в невырожденных состояниях. Рассмотрены влияние процесса измерения на результат измерения и применения положений теории резонанса к фторидам щелочных металлов.

### Выходные данные для цитирования русскоязычной печатной версии статьи:

Якубов А.Р. Энергии диссоциации фторидов щелочных металлов. *Бутлеровские сообщения*. 2024. Т.77. №3. С.20-27. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/24-77-3-20

### Выходные данные для цитирования русскоязычной электронной версии статьи:

Якубов А.Р. Энергии диссоциации фторидов щелочных металлов. *Бутлеровские сообщения В*. 2024. Т.7. №1. Id.13. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/24-77-3-20/ROI-jbc-RB/24-7-1-13

### The output for citing the English online version of the article:

Adel R. Yakubov. Dissociation energies of alkali metal fluorides. *Butlerov Communications B*. 2024. Vol.7. No.1. Id.13. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/24-77-3-20/ROI-jbc-B/24-7-1-13