

О ЗАВИСИМОСТЯХ ЭНЕРГИЙ АДСОРБЦИИ У НЕКОТОРЫХ СИСТЕМ, СОДЕРЖАЩИХ ЭЛЕМЕНТЫ VI, VII ГРУПП

А.Д. Осипов

Национальный научный центр «Харьковский физико-технический институт»,
Харьков, Украина

E-mail: adavikos@kipt.kharkiv.ua; тел. +38(057)335-62-93

Показано, что энергии адсорбции у ряда систем, содержащих элементы VI, VII групп, в значительной мере определяются комплектами эффективных функционалов, содержащих характерные атомно-электронные величины.

При получении веществ высокой чистоты и изучении влияния на них термических, механических и других воздействий необходимо учитывать много факторов, в частности, связанных с адсорбцией, взаимодействием с поверхностью различных примесей, газов, а также металлический компонент. Для изучения процессов адсорбции применяется квантово-химическое моделирование, используются потенциалы межатомных взаимодействий. При этом в ряде случаев встречаются значительные трудности: большие отклонения и разброс данных. Необходимо выяснить наиболее существенные факторы [1].

Целью данной работы является определение зависимостей между энергией адсорбции у некоторых систем, содержащих элементы VI, VII групп, и эффективными потенциалами, зависящими от атомно-электронных величин.

Для определения многих характеристик материалов используются зависимости, аналогичные учитываемым в [5], в методе эффективных потенциалов. При этом учитываются функционалы; основные, фундаментальные, модельные, корректирующие факторы и степени их влияния.

Для ряда характеристик в качестве основных используются факторы: зарядовые, энергоимпульсные, структурные и другие, определяющие необходимое приближение.

Для энергий адсорбции учитываются комплекты функций, включающие характерные числа электронов связи, потенциалы ионизации атомов, энергии взаимодействия и другие.

Выделяя наиболее существенные факторы, расчетные энергии адсорбции q^t у ряда систем А-В можно оценить из упрощенного выражения:

$$q_c^t = q_i \cdot C_q \cdot V_q + q_2, \quad (1)$$

где q_i – постоянная, эВ; $V_q = (V_q^A \cdot V_q^B)^{0,5}$.

Для элементов А:

$$V_q^A = V_d \cdot V_I \cdot V_v \cdot V_e, \quad \text{где } V_d = d_0/d_e, \quad d_e - \text{ меж-}$$

атомные расстояния, нм [3-5], $d_0 = 0,1$ нм;

$V_I = I_{Vi}/I_{Ki} \cdot I_i$ – i -й потенциал ионизации атомов, эВ [3]; I_{Ki} – величина, аналогичная I_{Vi} ; V_v – числа

связей; V_q^B – функция, аналогичная V_q^A ; C_q – функция, учитывающая степени влияния V_q ; q_2 ,

V_e – дополнительные составляющие.

В таблице приведены расчетные (q_c^t (1)) и известные (q_c) [3] энергии адсорбции у ряда систем А-В. Для некоторых систем А-В известны данные, значительно отличающиеся от приведенных в [3]. В связи с этим выбирались q_c , определенные в одинаковых условиях, их оптимальные значения или полученные при степени покрытия $\theta = 0$ [3], а также их усредненные величины.

Расчетные (q_c^t (1)) и известные (q_c [3]) энергии адсорбции у систем А-В, эВ

Материал	q_c		$\delta, \%$
	(1)	[3]	
Mo-F	5,10	4,56	+10
Mo-F ⁻	6,1	5,8	+5
Mo-Cl	3,75	4,11	-11
Mo-Cl ⁻	4,7	4,77	~1
Mo-Br	3,15	3,74	-19

При вычислениях q^t по (1) использованы значения величин из работ [3-5]: при этом для Mo $I_{Vi} = I_7$; для галогенов $I_{Vi} = I_8$, $I_{Ki} = I_i$; для нейтральных систем в (1) $q_2 \approx 0$; для элементов В $q_2 \approx 1$ эВ.

Аналогичные корреляции выполняются для ряда систем, содержащих элементы других групп.

Как видно из приведенных данных, имеются определенные соответствия расчетных и известных значений величин.

Это может свидетельствовать о том, что энергии адсорбции у рассмотренных систем в значительной мере определяются комплектами функций, величинами, использованными в выражении (1).

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Л.А. Богданова, С.В. Булярский. Моделирование химической адсорбции водорода углеродными нанотрубками // ФТТ. 2013, т. 55, №В3, с. 514-518.
2. А.Д. Осипов // Порошковая металлургия. 1992, №9, с. 88-91.
3. Свойства элементов. В двух частях. Ч.1. Физические свойства: Справочник. М.: «Металлургия», 1976, с. 400.

4. *Физические величины*: Справочник / Под ред. М.С. Григорьева, Е.З. Мейлихова. М.: «Энергоиздат», 1991.
5. К.С. Краснов, Н.В. Филиппенко, В.А. Баб-

кова и др. *Молекулярные постоянные неорганических соединений*: Справочник / Под ред. К.С. Краснова. Л.: «Химия», 1979, с. 448.

Статья поступила в редакцию 13.11.2013 г.

**ПРО ЗАЛЕЖНОСТІ ЕНЕРГІЙ АДСОРБЦІЇ В ДЕЯКИХ СИСТЕМ,
ЩО МІСТЯТЬ ЕЛЕМЕНТИ VI, VII ГРУП**

О.Д. Осінов

Показано, що енергії адсорбції у ряді систем, що містять елементи VI, VII груп, значною мірою визначаються комплектами ефективних функціоналів, що містять характерні атомно-електронні величини.

**ON DEPENDENCES OF ADSORPTION ENERGIES IN SOME SYSTEMS, CONTAINING
ELEMENTS OF VI, VII GROUPS**

A.D. Osipov

It is shown that energies of adsorption in some systems containing elements of VI, VII groups are determined to a significant degree by a set of effective functions including characteristic atom-electron values.