



Рис. 1. Оптимизированное геометрическое строение аниона NbF_7^{2-} (тип геометрической структуры — пентагональная бипирамида, симметрия D_{5h}).

так и реализовывать многоэлектронные процессы электровытеснения тугоплавких металлов и неметаллов, лежащие в основе метода высокотемпературного электрохимического синтеза [20].

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

Квантово-химические расчеты выполнялись неэмпирическим методом молекулярных орбиталей в рамках программного пакета GAMESS/Flitby (база SBK и MINI + rbfline) [21, 22].

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

На первоначальной стадии расчета была проведена полная оптимизация энергетических, зарядовых и геометрических характеристик аниона NbF_7^{2-} (рис. 1). Поиск абсолютного минимума полной энергии, соответствующего максимуму энергии релаксационных в объемной фазе расплава взаимодействий $M^{m+} \dots \text{NbF}_7^{2-}$ ($M = \text{K}^+, \text{Na}^+, \text{Li}^+, \text{Ca}^{2+}, \text{Mg}^{2+}$), проводили путем оптимизации их геометрических и энергетических параметров. Следует отметить, что выбор катионов K^+ , Na^+ дает не только прямое соответствие объекта расчета и эксперимента, но и позволяет моделировать влияние катиона на фонového электролита. Остальные катионы нами были взяты для расплава на сравнительной оценки возмущающего действия катионного состава.

Анализ результатов предварительно проведенных расчетов показал, что полная энергия аниона NbF_7^{2-} ($E = -586.82 \cdot 10^{-3}$ кДж/моль) больше суммы полных энергий фрагментов Nb^{5+} ($E = -134.97 \cdot 10^{-3}$ кДж/моль) и 7F^- ($E = -437.82 \cdot 10^{-3}$ кДж/моль) на $14.03 \cdot 10^{-3}$ кДж/моль, т.е. диссоциация "изолированного" аниона NbF_7^{2-} невозможна по энергетическим соображениям.