

ФАКТОРЫ ХИМИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ МЕТАЛЛИЧЕСКОЙ ПОВЕРХНОСТИ

Р.Н. Куклин, В.В. Емец

*Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина, РАН.
119991 Москва, Ленинский проспект 31, Россия. kuk-rudolf@yandex.ru*

Незащищенная поверхность металла легко вступает в химические взаимодействия с разнообразными веществами. Это свойство используют в катализе химических процессов. Оно же является основной причиной коррозии металлических конструкций, и тогда приходится изыскивать средства, ингибирующие процессы окисления. Общая теория химических реакций связывает реакционные акты с переносом электронов между взаимодействующими атомными системами [1]. Металл, обладающий свободными электронами, в этом свете, выступает в роли электронного резервуара. Однако понимание факторов, определяющих химическую активность металлической поверхности, в целом, не столь очевидно, и требует более глубокого погружения в сущность проблемы.

В работе исследуются факторы химической активности металлической поверхности в преломлении к их физической природе. Концепции химического связывания (выравнивание электроотрицательностей, максимум химической жесткости) соотнесены с теориями отклика поверхности металла на внешние электромагнитные возмущения. Для описания эффектов взаимодействия поля с электронами металла использованы уравнения теории Ландау-Мигдала [2] электронной ферми-жидкости. Анализ решения системы уравнений показал, что параметры отклика металлической поверхности на внешнее поле (химический потенциал электрона и плотность одночастичных электронных уровней вблизи энергии Ферми) идентичны основным характеристикам химической реактивности (электроотрицательности и химической жесткости). Согласно [1] плотность одночастичных электронных состояний вблизи энергии Ферми характеризует химическую мягкость (величину, обратную химической жесткости) и является одним из важнейших факторов, определяющих химическую связь.

Параметры, определяющие реакцию металла, одновременно характеризуют его способность к химическим превращениям. Авторам представляется, что использованный метод перспективен в дальнейших исследованиях фундаментальных основ природы физико-химических явлений на межфазных границах.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ грант 09-03-01074.

Литература

1. Yang W., Parr R.G. //Proc. Natl. Acad. Sci. USA 1985. V. 82. P. 6723.
2. Мигдал А. Б. Теория конечных ферми-систем и свойства атомных ядер. М.: Наука. 1965.