

О вариантах оценки компонент химической связи и необходимости учета степени металличности связи в химических веществах

© Сироткин¹⁺ Ростислав Олегович и Сироткин^{2*} Олег Семенович

¹ Кафедра технологии пластических масс. Казанский национальный исследовательский технологический университет. ул. К. Маркса, 68, г. Казань, 420015. Республика Татарстан.

Россия. Тел.: (843)231-43-22. E-mail: rsir@mail.ru

² Кафедра материаловедения и технологии материалов. Казанский государственный энергетический университет. ул. Красносельская, 51. г. Казань, 420066. Республика Татарстан. Россия.

Тел.: (843)519-43-22, (843) 279-92-29. E-mail: sirotkin-49@mail.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: степень ковалентности, степень металличности, степень ионности, химическая структура, свойства.

Аннотация

В настоящей работе представлено аналитическое обозрение вариантов описания химической связи в рамках классических представлений с учетом ее ковалентной, металлической и ионной компонент. При этом особое внимание уделено степени металличности связи и показана необходимость ее учета для правильной характеристики химической связи. Показано, что в среде химиков существует устойчивая потребность в описании химических связей с точки зрения ее ковалентности, металличности и ионности. Также показано, что попытки количественной оценки компонент химической связи (степеней ковалентности, металличности и ионности), предпринимаемые разными авторами по различным методикам не носят системный характер. Они охватывают ограниченный круг химических соединений и комплексно не оценивают влияние химического состава и соотношения компонент химической связи на структуру химических соединений (например, молекулярная или немолекулярная и так далее), которая в свою очередь определяет свойства вещества.

Авторами работы разработана методика определения двух или трех компонент гомо- и гетероядерной химической связи, соответственно, используя электроотрицательность. Показано влияние соотношения компонент связи на конкретные свойства веществ и материалов. Проведенная количественная оценка металличности гомо- и гетероядерных связей с использованием квантово-химических расчетов показала определенное совпадение данных с результатами, полученными через электроотрицательность. Также показано, что традиционные химические подходы с учетом химической практики не только не уступают квантово-химическим, но часто более адекватно описывают абсолютную величину и характер изменения степени металличности ряда связей.

Рассмотренные в статье примеры практического интереса различных авторов к характеристике химических связей с помощью различных методик в терминах ковалентности/металличности/ионности связаны, как правило, с необходимостью количественного описания различных типов химической связи. Это связано с необходимостью оценки влияния типа химической связи на структуру и конкретные свойства веществ, и зачастую с невозможностью это сделать, оперируя лишь квантово-механическими подходами.