

СТРУКТУРА И ЕЕ ТРАНСФОРМАЦИЯ В ТЕРМИНАХ ПЛОТНОСТЕЙ ЭЛЕКТРОННЫХ СИЛ: МЕЖАТОМНЫЙ ПЕРЕНОС ЗАРЯДА И СОПУТСТВУЮЩИЙ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ ОТКЛИК

Файзуллин Р.Р.^{1,@}, Карташов С.В.¹, Сайфина А.Ф.¹, Федонин А.П.¹,

Ившин К.А.¹, Сташ А.И.², Цирельсон В.Г.³

¹ *Институт органической и физической химии*

им. А.Е. Арбузова ФИЦ Казанский научный центр РАН

² *Институт элементоорганических соединений*

им. А.Н. Несмеянова Российской академии наук

³ *Российский химико-технологический университет*

им. Д. И. Менделеева

@ robert.fayzullin@gmail.com

Векторные поля электростатической и кинетической сил обнаруживают сходство с векторным полем градиента электронной плотности: в этих силовых полях можно выделить псевдоатомные фрагменты, определенные условиями нулевого потока в соответствующих полях плотностей сил, причем аттракторы потоков совпадают с положением ядер. Совместное рассмотрение векторных полей указанных сил и градиента электронной плотности позволило нам определить межатомный перенос заряда и обнаружить ранее неизвестное квантовое-химическое явление отклика в последствии переноса заряда, связанного с кинетическим и обменным статическим эффектами, а также условием равновесия. Это явление играет определяющую роль в формировании полярной химической связи. В целом, закономерности в поведении сил статической и кинетической природы позволяют механистически описать связанный атом, химическую связь, химическую структуру и ее изменение, что может быть применено для описания природы связи в кристаллах и супрамолекулярных системах и, как следствие, для разработки индикаторов химического связывания.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 22-13-00284).