

ХИМИЧЕСКАЯ СВЯЗЬ И МЕЖМОЛЕКУЛЯРНЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ: СМЕНИТСЯ ЛИ ПАРАДИГМА?

Цирельсон В.Г.

РХТУ имени Д.И. Менделеева, Москва, Миусская пл., 9

В течение XX-го века основные понятия химии были надежно вписаны в систему научного знания. Существенная часть химии опирается на представления о пространственном расположении атомов в молекулах, молекулярных системах и кристаллах, химическую связь между ними, а также зависимость физических и химических свойств кристаллов от их состава и строения. В силу этого, важнейшими элементами классической химической парадигмы являются теория симметрии, понятие атома как структурной единицы и теория химической связи и межмолекулярных взаимодействий. Мы проанализируем существующие в химии представления о природе и соотношении квантовой и электростатической компонент атомных и молекулярных взаимодействий в молекулах и кристаллах и сопоставим их с новыми данными о структуре этих образований на уровне непрерывного электронного континуума (плюс ядра). Эти данные стали доступными, благодаря развитию прецизионного рентгеноструктурного анализа, квантово-химических расчетных методов и методов трактовки получаемых результатов. Основной вывод работы, который не основан на модельных представлениях, состоит в том, что атом, как структурная единица химической картины мира, постепенно «расщепляется» на субатомные элементы, связанные с особенностями электронной плотности в связанных системах. Это позволяет более полно и точно охарактеризовать химическую связь и межмолекулярные взаимодействия в сложных системах.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Фонда Фундаментальных исследований (грант 16-03-00057а).