В 1860 году в Карлсруэ (Германия) химическим сообществом было принята двухуровневая модель строения вещества в виде атомно-молекулярного учения. А уже в 1861 г. А.М. Бутлеров впервые заложил основы теории химического строения вещества, которая нашла наибольшее применение в органической химии (теория химического строения органических соединений). Это было связано, прежде всего, с тем, что органические вещества являются преимущественно ковалентными соединениями элементов, то есть существуют в виде индивидуальных химических частиц - молекул. И именно Г. Льюис, развивший теорию ковалентной связи, показал ее как наиболее химически выраженную (локализованную, то есть образующую молекулы, прим. авторов) разновидность. Это, в свою очередь, обеспечило возможность более глубокого изучения преимущественно ковалентных - молекулярных - веществ с химической точки зрения (химические структурные формулы, изомеры и т.д.). Однако в тот период ионные и металлические химические соединения не охватывались этой теорией, что связано, по нашему мнению, со следующим. Во-первых, эти химические соединения не построены из молекул, и, во-вторых, в тот период отсутствовали теории, раскрывающие единство природы трех разновидностей химической связи и универсальная модель, их объединяющая. То есть ковалентная, ионная и металлическая разновидности химической связи рассматривались изолированно, и обслуживались (как подчас и сегодня) разными теориями. К сожалению, свой отрицательный вклад в замедление развития универсальных теорий связи и химической фундаментальности в целом внес и физический редукционизм [1-3]. Например, чего только стоит повторение давно устаревших догм одного из апологетов современной квантовой механики Р. Бейдера [4], пытающегося подменить теоретические основы химии физическими теориями, лишенными всякого химического смысла, типа: «Химия изучает свойства веществ и их превращения» (а что же остается тогда физике, биологии и т.д.? прим. авторов). Или еще одно, нелепейшее, и, безграмотное, по сути, утверждение Бейдера: «химия по существу есть исследование материи на атомном уровне»?!!! [4]. А ведь еще А.М. Бутлеров думал наоборот и различал индивидуальный атом и «химический атом», утверждая, что последний изменяет свое строение, входя в качестве элемента химической структуры вещества - молекулы. То есть химики не могут претендовать на изучение индивидуальных атомов, так как эта разновидность вещества имеет физическую, а не химическую структурную организацию [5-7]. При этом отметим, что, видимо, и поэтому до сих пор многими учеными не понимается очевидный факт, что только преимущественно ковалентная связь образует важнейшую разновидность химического соединения (химического вещества), называемого молекулой. Прежде чем приступить к изложению основного материала статьи, напомним читателю, что все химические вещества сегодня необходимо делить на два основных класса: гомо- и гетероядерные, а далее на два типа: молекулярные и

немолекулярные химические соединения [6-13]. Это деление опирается на фундаментальное положение, трактующее, что реальные химические связи не являются чисто ковалентными, металлическими или ионными, а промежуточными (смешанными) между двумя первыми (гомоядерные связи) или тремя вышеперечисленными (гетероядерные связи) [6-13]. При этом становится очевидным, что только преимущественно ковалентные связи, характеризующиеся максимальной локализацией электронов на оси между элементами, и обладают направленностью и насыщенностью, образуя молекулярные химические соединения постоянного состава (дальтониды). В свою очередь, преимущественно ионные и металлические связи образуют немолькулярные соединения с кристаллической структурой (бертоллиды) [6-15]. Целью настоящей работы является обобщение фундаментальных основ, обеспечивших превращение теории химического строения органических соединений А.М. Бутлерова в единую теорию строения химических соединений (ЕТСХС). При этом следует понимать, что А.М. Бутлеров решал в своей теории задачу раскрытия разницы в строении атома (физического соединения элементарных частиц) и молекулы (химического соединения атомных остовов). Таким образом, эта теория впервые показала реальность существования химической молекулярной структуры вещества в отличие от физической структуры индивидуального атома. В настоящей же работе авторы переносят акцент в развитии этой теории с понятий «химическое строение» и «молекула» на единство химической природы и специфику всего многообразия молекулярных и немолькулярных химических ковалентных, металлических и ионных соединений. Решение поставленной задачи, по мнению авторов настоящей статьи, возможно только при опоре на единую модель химической связи и систему, объединяющую все ее разновидности и, соответственно, основные базовые классы и типы гомо- и гетероядерных химических соединений - химических веществ [16]. Творческое развитие идей А.М. Бутлерова, опора на точку зрения Г. Льюиса (называвшего ковалентную связь чисто химической, но допускавшего возможность ее непрерывного перехода к другому предельному типу), попытки систематизации веществ по типу химической связи Х. Гримма [17] и подходы Л. Полинга привели авторов данной статьи к качественно новому взгляду на химическую связь [6-22]. Развивая квантово-химические представления Гайтлера и Лондона, и разрабатывая метод валентных связей, в 1939 году Л. Полинг, с позиций концепции резонанса, предложил рассматривать гетероядерную связь как наложение друг на друга двух состояний: ковалентного (К) и ионного (И) [18,19]. В результате, в реальных смешанных (промежуточных) типах связей эти состояния далее следует рассматривать как химические компоненты конкретного взаимодействия элементов с разным процентным вкладом, или соотношением, в каждой конкретной химической связи. В результате, опираясь на идею Льюиса о возможности непрерывного перехода между ними (1916г.),

Полинг получил эмпирическую зависимость, позволяющую количественно оценить по соответствующим формулам вклад этих двух компонент связи в гетероядерное взаимодействие. Особое значение при этом имеет мнение Л. Полинга о том, что «при промежуточных значениях структурных параметров для описания строения молекулы может быть использована волновая функция $aY(A:B) + bY(A+ B-)$, являющаяся линейной комбинацией волновых функций, отвечающих нормальной ковалентной структуре $A:B$ и ионной структуре $A+ B-$ с численными коэффициентами a и b , причем отношение коэффициентов a/b выбирается для каждого ряда структурных параметров таким, чтобы энергия связи была максимальной». И далее, «Для промежуточных значений относительных электроотрицательностей (элементов, прим. авторов) A и B , когда коэффициенты a и b в волновой функции $aY(A:B) + bY(A+ B-)$ примерно равны по величине, связь можно представить как резонирующую между предельно ковалентной и предельно ионной». В результате теория резонанса впервые подвела фундаментальную основу под осуществление практической возможности количественной оценки вклада этих двух компонент в характеристику реальной - смешанной - химической связи и промежуточных значений структурных параметров соединения с использованием волновой функции (Y) валентных электронов. Последняя была представлена в виде линейной комбинации Y , учитывающей наложение двух предельных типов структур (ковалентной и ионной) и резонанс между ними в процессе обменного взаимодействия химических элементов в виде ядер или атомных остовов [18,19]. Развивая эти подходы, авторами настоящей статьи в 1991-1992 годах [20] было предложено рассматривать любую гомоядерную связь (химическая связь одинаковых элементов) как наложение на ковалентную компоненту металлической составляющей. То есть любую гомоядерную связь можно представить в виде суммарной волновой функции ($\Psi_{OЭ}$) обобществленных (валентных) электронов ($OЭ$), резонирующих между предельно ковалентным (типа $F-F$) и предельно (а точнее, максимально) металлическим ($Fr---Fr$) вариантами взаимодействия элементов. При нарушении равновесия резонанса в ту или другую сторону имеет место рост одной из этих двух компонент химической связи и соответствующее уменьшение другой. , (1) где A - ядра или атомные остовы элемента соответствующей гомоядерной связи; - ковалентная составляющая в суммарной волновой функции, - металлическая составляющая в суммарной волновой функции, характеризуемая смещением ($\uparrow$) обобществленных электронов; SK и SM - коэффициенты, определяющие, соответственно, долю ковалентной и металлической компонент гомоядерной связи (в интервале от 100% до 0% или от 1 до 0). Термин «максимально металлический» предполагает возможность существования металлов и с большей металличностью гомосвязи, чем у Fr , так как Периодическая система Д. И. Менделеева (ПС) дополняется новыми элементами в нижней ее части, а не в

верхней. Это дополнительно подтверждает правильность выбора связи F-F в качестве «предельно» ковалентной (100%) в нормальных условиях по сравнению с другими гомоядерными связями элементов ПС, так как обобществленные электроны в ней максимально локализованы в межъядерном пространстве между атомными остовами фтора. На основании этого для определения степеней ковалентности (СК) и металличности (СМ) гомоядерных связей (в %) нами вначале были предложены формулы для их расчета через первый потенциал ионизации (I1 или ППИ) и электроотрицательность (ЭО) [20]. Далее была разработана уточненная шкала ЭО, где все элементы, в отличие от традиционных шкал, включая шкалу Полинга, имели отличные друг от друга значения ЭО [11-14]. А затем были разработаны и квантово-химические методики оценки химических компонент связи в гомо- и гетероядерных соединениях [11,21,22]. И уже затем, в отличие от Л. Полинга, была обоснована необходимость учета металлической компоненты связи не только в гомоядерном, но и в гетероядерном взаимодействии элементов [7]. Далее, совершенствуя методологию описания и расчета [11-16] реальных смешанных (промежуточных) типов взаимодействия элементов тонкой электронно-ядерной структуры химических соединений, с единых научных позиций и опираясь на уравнение Шредингера и теорию Полинга, в приложении волновой функции и резонанса к трем компонентам химической связи предложена единая модель химического взаимодействия [7,9-16]. То есть любую гетероядерную связь можно представить в виде суммарной волновой функции обобществленных (валентных) электронов ($\Psi_{OЭ}$):
$$\Psi_{OЭ} = A \psi_A + B \psi_B + C \psi_C$$
 (2) где А и В - ядра или атомные остовы различных элементов в соответствующей гетероядерной химической связи; СК, СМ и СИ - коэффициенты, определяющие долю ковалентной, металлической и ионной составляющих связи, которые в сумме равны единице или 100%; - ковалентная составляющая в суммарной волновой функции ОЭ (ковалентная компонента); - металлическая составляющая в суммарной волновой функции ОЭ (металлическая компонента); - ионная составляющая в суммарной волновой функции ОЭ (ионная компонента). Уравнение (2) и расшифровка обозначений, отображающих в нем вклад трех компонент химической связи, наглядно раскрывает смысл понятий «ковалентность», «металличность» и «ионность» в рамках ее единой модели. Это достигается через оценку значений СК, СМ и СИ в % (или в долях), определяющих специфику процессов «локализации-делокализации» ОЭ в межъядерном пространстве химически связанных элементов и их зависимость от изменения этих характеристик. При переходе от гетероядерной связи к гомоядерной уравнение (2) преобразуется в уравнение (1) ввиду отсутствия в гомоядерном взаимодействии ионной компоненты. По сути, уравнения (1) и (2) представляют современный симбиоз классических и квантово-механических подходов для описания реальных промежуточных разновидностей химических связей в рамках единой универсальной модели. В

рамках единой модели связи интегральной характеристикой, вскрывающей общий характер распределения (локализации-делокализации) связывающих электронов (обобществленной электронной плотности) между атомными остовами или ядрами химического соединения, является степень обобществления электронов (СОЭ). СОЭ можно определить через количество атомных остовов (или ядер) в структуре химического соединения (n), локализуемых при себе электронную плотность (обобществленные валентные электроны), возникающую при образовании соответствующей химической связи. Для предельных (формальных) типов химических связей (ионной, ковалентной и металлической) n соответственно равны: 1, 2 и ∞ , а СОЭ определяется следующим образом: $СОЭ = 100 - 100/n, \%$ (3) В результате СОЭ для предельных («формальных») связей равны: ионной связи $СОЭ = 100 - 100/1 = 0\%$ (СИ = 100%); ковалентной связи $СОЭ = 100 - 100/2 = 50\%$ (СК = 100%) и металлической связи $СОЭ = 100 - 100/\infty = 100\%$ (СМ = 100%). Термин «формальных» типов химических связей говорит о том, что в реальных химических соединениях связи являются в подавляющем большинстве смешанными, а не предельными 100%, за исключением ковалентной, характеризующейся максимальной локализацией локализацией ОЭ на оси Y между элементами (рис. 1). Кроме того, при $СОЭ = 0$ химическая связь на 100% должна превратиться в ее ионную разновидность, а это значит, что ОЭ должны полностью локализоваться на одном более электроотрицательном элементе, который в результате превращается в индивидуальный анион, химически уже не связанный посредством обменного взаимодействия с другим элементом, превращенном в противоион (катион). То есть в этом случае химическая связь прекращает свое существование, так как обобществленные электроны, фактически, уже не являются таковыми по существу, ввиду их принадлежности уже только одному атомному остову (ядру). Таким образом, $СОЭ \neq 0$ является основным условием возникновения обменного взаимодействия элементов и образования химической связи. Тот же эффект по прекращению существования химического взаимодействия наблюдается и при $СОЭ = 100\%$, так как в этом случае химическая связь на 100% становится металлической и ОЭ становятся 100% делокализованными в межъядерное пространство, потеряв свою обменную роль между элементами. Рис. 1 - Плоскостное изображение возможной локализации - делокализации ОЭ вдоль оси X - металлической (М) и вдоль оси Y - ионной (И) составляющих (компонент) химической связи атомных остовов (ядер) гомо- (Э'-Э') и гетероядерных (Э'-Э'') структур в рамках единой модели химической связи, где точка К характеризуется 100% ковалентностью, или предельной локализацией ОЭ на оси Y В результате, основы единой модели химической связи элементов веществ и материалов, связывающей три ее разновидности в «Химический треугольник» с вершинами К-М-И (рис. 1 и 2) базируются на следующих основных положениях [7-13]: - любая химическая связь образуется в результате перекрывания

электронных оболочек атомов, приводя к появлению обобществленных электронов (ОЭ) и более выгодной энергетически химической системы, где атом теряет свою индивидуальность, превращаясь в ядро или атомный остов, а природа равновесия этих химических элементов в качественно новой химической вещественной системе является обменно-электростатической; - все реальные типы химической связи, за исключением предельной 100% ковалентной, являются смешанными, то есть промежуточными между ее двумя или тремя ее разновидностями. Все гомоядерные связи элементов характеризуются разным соотношением двух (СК и СМ), а гетероядерные - трех компонент (СК, СМ и СИ) их составляющих, причем одной из этих компонент обязательно является ковалентная, которая не может быть равна 0; - уровень и характер локализации-делокализации ОЭ в межъядерном пространстве задается соотношением компонент химической связи (СК, СМ и СИ, %), а структура и свойства гомо- и гетероядерного химического соединения на ее основе определяются основной компонентой, которая преобладает над остальными, а также степенью обобществления электронов (СОЭ). Данная единая, универсальная модель химического взаимодействия элементов позволяет объяснить многообразие известных на сегодня индивидуальных химических соединений (порядка 15 млн.), включая существование полиморфных или аллотропных модификаций гомоядерных соединений железа, углерода и т.д. Она же позволяет прогнозировать структуру (молекулярная или немоллекулярная и т.д.) и свойства индивидуальных химических веществ и, самое главное, эта модель (рис. 1) служит фундаментальной основой Системы химических связей и соединений - СХСС в виде «Химического треугольника» (рис. 2) [7,9-16]. Рис. 2 - "Химический треугольник" как единая Система химических связей и соединений (СХСС), веществ, металлических и неметаллических материалов на их основе © Сироткин О.С., 1992 В результате появления единой модели химической связи и СХСС позволяет эволюционно наполнить и развить теорию химического строения органических (молекулярных) соединений А.М. Бутлерова в сторону расширения универсальности и практической применимости. Причем не только для органических соединений и молекул, но и для всего многообразия металлических и неметаллических молекулярных и немоллекулярных химических веществ и материалов. Ведь сегодня главным фундаментальным понятием химии является не просто молекула, а гомо- (простое химическое вещество) или гетероядерное молекулярное (преимущественно ковалентное) или немоллекулярное (преимущественно ионное или металлическое) химическое соединение. И именно единая модель химической связи и СХСС как базисные научные инновации [3,5-16] и позволяют развить и наполнить новым химическим содержанием и смыслом теорию химического строения А.М. Бутлерова, превратив ее в единую теорию строения химических соединений (ЕТСХС). Рассмотрим основные положения ЕТСХС [5-7,13]. Началом или точкой отсчета

любой строгой науки являются её постулаты [5-7,23]. Первый химический постулат: химическая вещественная форма существования материи является индивидуальной. Следовательно, химическое вещество (молекулярное и немолекулярное) характеризуется фундаментальными отличиями от веществ физического и биологического уровней материальной организации. Второй химический постулат: химическое соединение (химическое вещество) является главным фундаментальным объектом и понятием химии. Следствием этого постулата является вывод о том, что именно химическое соединение (гомо- и гетероядерное химическое вещество) формирует фундаментальную индивидуальность предмета химии - и как науки, и как учебной дисциплины. Из данного постулата следует, что химия начинается с химического вещества - химического соединения, специфика которого и определяет фундаментальные ее отличия от физики, биологии и т.д. Третий химический постулат: в условиях Земли (н.у.) химическое соединение является наиболее естественным и распространенным видом вещественной материи, а его превращение - наиболее распространенной формой движения материи на Земле. Дальнейшее развитие единых теоретических начал химии и установление её фундаментальных отличий от физики следует ожидать через раскрытие индивидуальности следующих пяти основополагающих фундаментальных понятий химии: химическое соединение (химическое вещество), химическая связь, химическое строение (химическая структура), химическая реакция (химическое превращение) и химическое свойство (химическая реакционная способность и т.д.). А далее необходимо создание единой номенклатуры химических соединений и Международной системы химических величин. При этом не подвергается сомнению тезис о плодотворности сотрудничества химии с другими науками в пограничных областях (и прежде всего с физикой и биологией) при условии сохранения и возможности развития фундаментальной индивидуальности каждой из них в своей предметной области [3,5-27].

Основополагающие положения химии (как и любой другой естественной науки) должны раскрывать причинно-следственные связи, определяющие: (1) возникновение и устойчивое существование соответствующего конкретного уровня организации материи или вещества (в данном случае химического); (2) специфику, природу и тип его структурной организации (химической структуры) и (3) особенности его свойств (химических и физико-химических). Приведем следующие варианты их дефиниций, обобщающие не только основы ЕТСХС (или теории единой химии), но и основы общей и неорганической химии в целом. В результате первое фундаментальное положение ЕТСХС, определяющее принципиальную возможность образования и существования химического соединения, может быть сформулировано следующим образом: «Образование химического соединения как качественно новой по сравнению с атомом объективно существующей индивидуальной вещественной формы материи и его

стабильное существование определяется возможностью эффективного перекрывания электронных оболочек индивидуальных атомов, приводящего к устойчивому обмену между ними электронами, их обобществлению и, соответственно, к химическому связыванию этих атомов». Сокращенный вариант данной дефиниции: «Образование химического соединения определяется возможностью устойчивого обмена электронами и их обобществлением между индивидуальными атомами». Следствием данного химического связывания атомов является межуровневое преобразование (по существу прямое физико-химическое превращение) вещества физического уровня (атома - физического соединения элементарных частиц) в вещество химического уровня (химическое соединение атомных частиц). В результате этого атом теряет свою индивидуальность, превращаясь в ядра (или атомные остовы), которые входят в структуру химического соединения в виде соответствующих элементов.

Математическое выражение этого положения как главного фундаментального условия возникновения и существования химического вещества через степень обобществления электронов (СОЭ) имеет следующий вид, в процентах: $0 \leq \text{СОЭ} \leq 100$ (4) Взаимосвязь строения химических соединений с их составом и типом химической связи определяет второе фундаментальное положение, которое можно представить следующим образом: «Структура химического соединения (химического вещества) в первую очередь определяется его составом (гомо- и гетероядерный), элементной природой (s-, p-, d-, f-), видом (катион, анион и т.д.) ядерных центров (атомных остовов), их количеством и пространственным расположением, то есть степенью обобществления электронов, характером их локализации - делокализации и, соответственно, типом химической связи между остовами». Сокращённый вариант формулировки данного положения: «Структура химического соединения (химического вещества) определяется типом связи между элементами, его образующими». Данное положение может быть выражено через интервал изменения основных химических компонент связи от 0 до 100 (в %) в соответствующих гомо- и гетероядерных структурах: $0 \leq \text{СК} \leq 100$ (5) $0 \leq \text{СМ} \leq 100$ (6) $0 \leq \text{СИ} \leq 100$ (7) Третье фундаментальное положение, характеризующее взаимосвязь свойств химических соединений с их структурой (химическим строением) можно представить в следующем виде: «Свойства химического соединения (химического вещества) определяются его структурой (химическим строением)». Фактически, вышеприведенное положение является результатом современного развития и трактовки основного положения теории химического строения А.М.Бутлерова, утверждающего, что «свойства молекулы определяются... её химическим строением». Приведенные данные свидетельствуют об актуальности, важности и перспективности эволюционного развития теории химического строения органических соединений А.М. Бутлерова в единую теорию строения химических соединений (ЕТСХС). Это позволяет заложить новые единые фундаментальные химические основы общей и

неорганической химии, направив акцент в ее изучении и изложении на раскрытие, прежде всего, химического, а не физического смысла в основах этой науки.