

Специфика химической структуры гомо- и гетероядерных соединений элементов (ядер или, в большинстве случаев, атомных остовов), а также веществ и материалов на их основе является базовой для всех их видов, которая во многом и определяет особенности их природы, и диапазон их физико-химических и механических свойств [1-3]. Ранее в рамках единой модели химической связи и Системы химических связей и соединений (СХСС), как альтернативы Периодической системе физических соединений элементарных частиц в виде атомов Д.И. Менделеева [1], было установлено прямое влияние химической структуры на некоторые свойства гомо- и гетероядерных соединений элементов через соотношение степеней ковалентности (СК), металличности (СМ) и ионности (СИ) связей (в %) [1-10]. Однако системной оценки влияния химической природы вещества на его электрические свойства до последнего времени не проводилось. Целью настоящей работы является вскрытие влияния специфики химической природы веществ на их электрические свойства в рамках единой модели химической связи, определяющей возможность прямой оценки влияния характера «локализации - делокализации» электронной плотности в межъядерном пространстве через СК, СМ и СИ на эти свойства. Электрические свойства характеризуют поведение веществ и материалов в электрическом поле с соответствующим напряжением [9]. К ним относят электропроводность и электрическое сопротивление ( $R$ ) или удельное электрическое сопротивление ( $\rho_0$ ). Электропроводность ( $\rho$ ) - это способность вещества или материала к переносу под действием электрического поля носителей зарядов (электронов и ионов). Она оценивается через удельную электропроводность ( $\text{Ом м}^{-1}$ ), характеризующую перенос электрического заряда под действием внешнего поля, через отношение плотности тока к напряженности поля. Эта характеристика обратная удельному электрическому сопротивлению. Электрическое сопротивление ( $\text{Ом}$ ) характеризует способность материала препятствовать протеканию через него электрического тока с заданным напряжением. Она численно равна отношению электрического напряжения на концах проводника к силе тока, проходящего через него. Удельное электрическое сопротивление ( $\text{Ом}\cdot\text{м}$ ) - это характеристика электрического сопротивления материала определенной длины ( $L$ ) и площади поперечного сечения ( $S$ ):  $\rho_0 = R \cdot S / L$ . (1) Традиционно электрические свойства относят к физическим, а не к химическим характеристикам вещества. При этом под химическими свойствами вещества обычно понимают, прежде всего, его способность вступать в химические реакции, включая коррозионную стойкость и т.д. Однако в рамках очевидной аксиомы, трактующей, что свойства веществ и материала всегда являются функцией их структуры [1,10], которая в большинстве случаев является многоуровневой и начинается с базовой электронно-ядерной (химической) микроструктуры [2,10], отнесение электрических свойств к чисто физической их разновидности сегодня

представляется сомнительным. И этот критический вывод опирается на очевидную зависимость электрических свойств от химической природы вещества [1-10]. По электрическим свойствам, через удельное электрическое сопротивление ( $\rho_0$ ), электротехнические материалы можно разделить на: проводники ( $10^{-8}$  -  $10^{-5}$ ), полупроводники ( $10^{-5}$  -  $10^8$ ) и диэлектрики ( $10^8$  -  $10^{18}$ ). При этом очевидно, что к первым относят вещества, характеризующиеся преимущественно металлической связью элементов в их микроструктуре, третьим – преимущественно неметаллической ковалентной и ионной (обобществленные электроны локализованы либо на связи, либо на анионе), а ко вторым – связями, промежуточными между связями, присущими первому и третьему типам материалов. Например, характер изменения  $\rho_0$  в ряду гомоядерных соединений элементов Cu ( $1,5 \cdot 10^{-8}$ ), Al ( $2,4 \cdot 10^{-8}$ ), Fe ( $8,6 \cdot 10^{-8}$ ), Sn ( $3,9 \cdot 10^{-7}$ ), Hg ( $9,4 \cdot 10^{-7}$ ), Si ( $1,0 \cdot 10^{-3}$ ), Br ( $1,8 \cdot 10^4$ ), P ( $1,0 \cdot 10^9$ ) свидетельствует следующее. Переход от чистых металлов (медь, алюминий и т.д.) к неметаллам (типа брома и фосфора) приводит к росту удельного электрического сопротивления веществ. А это можно связать с ростом вклада ковалентной и уменьшением металлической составляющих гомоядерных связей элементов их микроструктуры, а далее появлением в последних на следующих уровнях молекул и надмолекулярных образований [9,10]. В результате соотношение ковалентной и металлической компонент гомоядерной связи можно связать с удельным электрическим сопротивлением и возможностью использования этих химических характеристик вещества для оценки его электрических свойств, в частности для разделения веществ и материалов (см. табл.1) на три основных группы: проводники (П), полупроводники (П/П) и диэлектрики (Д/Э) Таблица 1 - Удельное электрическое сопротивление различных материалов при 20С° и постоянном напряжении Класс материала СК/СМ, % Ширина ЗЗ, эВ  $\rho_0$ , Ом·м

Класс материала	СК	СМ	Ширина ЗЗ, эВ	$\rho_0$ , Ом·м
Проводники (П)	СК	СМ	0	$10^{-8}$ - $10^{-5}$
Полупроводники (П/П)	СК $\approx$ СМ		0,05-3,00	$10^{-5}$ - $10^8$
Диэлектрики (Д/Э)	СК > СМ		Более 3	$10^8$ - $10^{18}$

Следует отметить, что эти химические характеристики вещества (СК и СМ) не только не противоречат данным зонной теории (табл.1), объясняющей разделение этих материалов по электропроводности на три группы, исходя из физических подходов. Они, наоборот, дополняют эти данные, вскрывая химический смысл электрических свойств веществ. Ведь с увеличением СК и уменьшением СМ, вследствие увеличения локализации обобществленных электронов, их подвижность и способность к свободному передвижению в межъядерном пространстве падает и, как следствие, ширина запрещенной зоны (ЗЗ) растет при переходе от полупроводников к диэлектрикам (табл.1.). Специфика химической природы этих материалов определяет и изменение в них типа проводимости, по сравнению с проводниками: преимущественно металлическая связь - электронный, преимущественно ионная связь - ионный и т.д. Рис. 1 - Зависимость удельного электрического сопротивления простых веществ на

основе гомоядерных химических соединений различных элементов Периодической системы от СМ На рис. 1 представлена зависимость удельного электрического сопротивления  $\rho$  от СМ [2], из которой видно, что в ней можно выделить две области, образованные соответствующими веществами или материалами. Первую нижнюю область образуют металлы; для нее характерно относительно небольшое абсолютное значение градиента  $\Delta\rho/\Delta\text{СМ}$ . Вторую область образуют полупроводники и диэлектрики; данная область характеризуется бóльшим абсолютным значением градиента  $\Delta\rho/\Delta\text{СМ}$ . Условной границей между этими двумя областями можно считать значение  $\text{СМ} \approx 50\%$  (и, соответственно, СК также около 50 %). Таким же образом, прослеживается влияние химической природы веществ (табл.2) и в гетероядерных соединениях на их электрические свойства, например в оксидах [11]. В данной таблице также выделены области преимущественного существования оксидов в виде различных молекулярных и немолекулярных структур. Таблица 2 -

Периодическая система (ПС) соотношений (в %) основных компонент (СК, СМ, СИ) химических гетероядерных связей Э-О в оксидах элементов Из анализа соотношения компонент химической связи Э-О (табл.2) и электрических свойств соответствующих оксидов можно сделать следующие выводы [11].

Диэлектрические свойства проявляют те оксиды р-элементов (Д/Э), в которых СК связи Э-О превышает сумму СМ+СИ, то есть  $>50\%$ , или оксиды s- и d-элементов, в которых СИ превышает 37%. Полупроводниковые оксиды образуются в случае, когда соблюдаются следующие условия: СК – от 40 до 50%, СМ от 22,5 до 24% и СИ от 26,7 до 35,8%. Эти условия появляются при переходе связей Э-О к центру ПС. В середине этих интервалов образуются П (типа соединений на основе связей кислорода с рутением, рением, осмием, иридием и таллием): СК: 44-46,5%, СМ: 23,0-23,5% и СИ: 30,5-32,5%. Сверху вниз в группах ПС растет вероятность образования П и П/П, что объясняется возрастающим вкладом элементов с большей СМ. В то же время внутри 5-го и 6-го периодов налицо максимум роста электропроводности в середине периода [11]. Еще более явно эта зависимость прослеживается не только в гетероядерных, а в гомоядерных (простых) химических веществах [2,11,12]. Таким образом, в данной работе раскрыта природа проявления тех или иных электрических свойств веществ и материалов, как функции определяемой типом химической связи элементов их образующих.