

Таблица 1

Величины порядков связей V_{ij} для металлокомплексов $(M^{m+}[NbF_7]^{2-})^{(m-2)+}$ (выборочные данные)

Вид металлокомплекса	тип	V_{ij}		
		Nb-F ₍₁₎	Nb-F ₍₆₎	M-F ₍₆₎
NbF_7^{2-}	0	0.654	0.654	—
$(K^+[NbF_7]^{2-})^-$	m	0.665	0.372	0.057
	b	0.670	0.450	0.064
	t	0.725	0.497	0.072
$(Li^+[NbF_7]^{2-})^-$	m	0.717	0.208	0.208
	b	0.700	0.231	0.203
	t	0.736	0.353	0.221
$(Mg^{2+}[NbF_7]^{2-})^-$	m	0.801	0.218	0.232
	b	0.815	0.222	0.235
	t	0.821	0.258	0.247

Таблица 2

Величины заселенностей АО комплексов ниобийсодержащих расплавов (выборочные данные)

Вид комплекса		NbF_7^{2-}	$(M^{m+}[NbF_7]^{2-})^{(m-2)+}$		
атом	орбиталь		M = Li	M = Ca	M = Mg
Nb	$4d_{x^2-y^2}$	0.303	0.285	0.269	0.226
	$4d_z$	0.324	0.271	0.269	0.260
	$4d_{xy}$	0.321	0.246	0.245	0.227
	$4d_{xz}$	0.179	0.301	0.245	0.213
	$4d_{yz}$	0.178	0.256	0.296	0.325
F ₍₁₎	$2P_y$	1.357	1.333	1.324	1.337
	$2P_z$	1.277	1.268	1.320	1.357
F ₍₆₎	$2P_y$	1.286	1.301	1.366	1.323
	$2P_z$	1.336	1.381	1.373	1.265
F ₍₇₎	$2P_y$	1.251	1.365	1.372	1.306
	$2P_z$	1.386	1.317	1.338	1.342

Сравнительный анализ зарядовых характеристик на атомах по Левдину показывает, что характер изменения связей Nb-F при приближении катиона M^{m+} к аниону NbF_7^{2-} сопровождается не только перераспределением заряда на катион с анионных атомов фтора, но и с центрального атома аниона (атома ниобия), а степень такого перераспределения усиливается с увеличением удельного заряда катиона, причем эта тенденция для катионов фонового электролита (K^+ и Na^+) выражена не столь заметно (рис. 3). Особенно следует подчеркнуть, что катионы более сильного поляризующего