

Таблица 4

Зарядные характеристики исследуемых взаимодействий

Взаимодействие	<i>n</i>	Nb	F ₍₁₎	F ₍₉₎	M ₍₁₎
NbF ₂ ²⁺	0	1,072	-0,433	-0,450	-
	1	1,153	-0,343	-0,460	0,637
	2	1,243	-0,295	-0,514	0,697
	3	1,250	-0,364	-0,469	0,796
dMg ²⁺ ...[NbF ₂ ²⁺] ⁻¹	4	1,288	-0,252	-0,477	0,797
	5	1,394	-0,345	-0,463	0,824
	6	1,397	-0,389	-0,414	0,881
	7	1,405	-0,400	-0,414	1,000
	1	1,183	-0,279	-0,528	1,508
	2	1,318	-0,206	-0,482	1,678
	3	1,391	-0,300	-0,636	1,703
4	1,487	-0,345	-0,616	2,000	

эпронных частиц происходит по продолжениям связей Nb—F (монодентатное взаимодействие).

Сравнительный анализ зарядовых характеристик на атомах по Девлинну в "изопронанном" NbF₂²⁺ и металлокомплексах позволяет сделать вывод о том, что внешнесферная катионизация сопровождается перераспределением заряда в целом с аниона на катионы (табл. 4), а степень переноса заряда усиливается как с увеличением удельного заряда катиона, так и с ростом концентрации катионов (табл. 4).

Особенно следует подчеркнуть, что катионы сильно поляризуемого действия с увеличением удельного заряда, а также с ростом координационного числа *n* при взаимодействии с анионом стимулируют, аналогично монокатионным взаимодействиям, перераспределение заряда с центрального атома Nb аниона NbF₂²⁺ (больше, чем у атомов фтора) на катионы для всего спектра координационных чисел (табл. 4), вызванный ослаблением связей Nb—F и смещая реакцию (1) в направлении (в).

Сравнительное рассмотрение заселенностей атомных орбиталей (АО) в анионе NbF₂²⁺ и соответствующих металлокомплексах (табл. 5) позволяет установить предмупрежденный перенос заряда с аниона на *s*-орбитали катионов. Следует отметить, аналогично монокатионным взаимодействиям [23], роль центрального атома (атома Nb) за счет наличия его *d*-орбиталей, которые принимают на себя главную "нагрузку" в миграции электронной плотности, тем самым превращая его, наряду с катионами, в наиболее вероятный центр "электронной атаки" в последующих реакциях электропослабления металлосложных частиц.

Предложенная выше концептуальная схема для монокатионных взаимодействий реализуется с ростом координационного числа по катиону и наиболее отчетливо реализуется с увеличением удельного заряда катиона. Поэтому, на основании проведенных квантово-химических расчетов можно заключить, что влияние катионов металла на внутримолекулярную поляризацию аниона проявляется в инициировании перераспределения электронной плотности по донорно-акцепторному механизму, созда-