

**ANALIZA CZYNNIKÓW WARUNKUJĄCYCH STRUKTURĘ ZWIĄZKÓW KOMPLEKSOWYCH
PIERWIĄSTKÓW GRUP GŁÓWNYCH I TWORZONYCH PRZEZ NIE FAZ KRYSZALICZNYCH.
NOWY WEKTOROWY MODEL WALENCYJNOŚCI WIĄZAŃ**

Janusz Zachara

*Katedra Chemii Nieorganicznej i Technologii Ciała Stałego,
Wydział Chemiczny Politechniki Warszawskiej*

Olbrzymi postęp ilościowy i jakościowy w badaniach strukturalnych związków chemicznych wymusza potrzebę rozwijania istniejących, a także tworzenia nowych koncepcji służących chemii strukturalnej do systematycznej analizy czynników warunkujących strukturę związków i tworzonych przez nie faz krystalicznych. Prowadząc krystalograficzne badania struktur związków chemicznych będących przedmiotem zainteresowania współczesnej chemii koordynacyjnej starałem się nie ograniczać jedynie do określenia struktury związku chemicznego, ale dążyłem do pokazania jak na tworzenie zróżnicowanych struktur wpływa rodzaj ligandu i natura centrum koordynacji, oraz do sformułowania ogólnych relacji strukturalnych. Korzystając z tych doświadczeń opracowałem nowy model strukturalny - wektorowy model walencyjności wiązań (*bond-valence-vector, BVV*), nawiązujący do skalarne go modelu walencyjności (*bond-valence model, BVM*), szeroko stosowanego w różnych gałęziach współczesnej chemii strukturalnej. Istotną zaletą modelu *BVV* jest prosta zależność pomiędzy długością wektora walencyjności a walencyjnością wiązania. Może być wykorzystany jako użyteczne narzędzie do analizy budowy sfer koordynacyjnych w homo- i heteroleptycznych kompleksach pierwiastków grup głównych oraz do weryfikacji krystalograficznych danych strukturalnych.

W wykładzie przedstawię założenia modelu wektorowego oparte na elektrostatycznej interpretacji walencyjności, które pozwoliły mi na wyprowadzenie podstawowej reguły mówiącej o zerowaniu się sumy wektorów walencyjności wiązań dla kompletnych sfer koordynacyjnych (*bond-valence-vector sum rule*). Zaprezentuję wyniki analizy danych strukturalnych, przeprowadzonej dla wybranych klas związków o różnych liczbach koordynacyjnych celem empirycznego potwierdzenia zasadności modelu. Pokażę, że zaproponowany model umożliwia ilościowy opis naprężeń oraz identyfikację oddziaływań w strukturach faz krystalicznych, i co jest szczególnie warte podkreślenia, ilościowy, wektorowy opis strukturalnego efektu wywołanego obecnością wolnej pary elektronowej centrum koordynacji.