

Химические связи — межатомные взаимодействия, которые приводят к образованию *молекул*, молекулярных соединений, кристаллов. Важная особенность процесса формирования химических связей (отличие его от других видов межатомных взаимодействий) — это перестройка электронных оболочек взаимодействующих *атомов*. В результате этой перестройки энергия образующейся системы атомов оказывается меньше суммы энергий отдельных атомов, и молекулярная система стабилизируется. Химические связи имеют электромагнитную природу, однако полное их описание возможно только в рамках квантовой теории. Разработаны различные теоретические приближения для квантовомеханического описания механизмов образования химических связей (метод валентных связей, теория молекулярных орбиталей, теория кристаллического поля).

В образовании химических связей участвуют внешние (валентные) электроны атомов (см. также *Валентность*). Тип химической связи определяется тем, как происходит перераспределение электронной плотности при образовании связи. Энергии сильных химических связей составляют 2–10 эВ, слабых — 0,1–1 эВ и ван-дер-ваальсовых — менее 0,05 эВ. У двухатомных молекул энергия химической связи определяется как энергия диссоциации.

Различают две основных модели типов химической связи (валентного межатомного взаимодействия): ионная и ковалентная. Ионная связь образуется при переносе одного или нескольких валентных электронов с одного атома на другой. Например, при сближении атомов Na и Cl единственный электрон незаполненной внешней оболочки атома натрия переходит к атому хлору, у которого для полного заполнения внешней оболочки одного электрона не хватает. Электростатическое взаимодействие ионов Na^+ и Cl^- приводит к формированию устойчивой химической связи. Ковалентная связь возникает при обобществлении электронов двумя или группой атомов с одинаковыми или близкими по структуре внешними электронными оболочками (например, H и H, N и N, C и O и др.). При сближении атомов появляется вероятность взаимообмена электронами, в результате чего возникает квантовый эффект так называемого обменного взаимодействия между электронами. В случае обобществления электронов с антипараллельными проекциями спинов обменное взаимодействие приводит к увеличению электронной плотности в межатомном промежутке и образованию устойчивой химической связи. Для пары электронов с параллельными проекциями спинов электронная плотность в межатомном промежутке уменьшается, при этом сила отталкивания ядер возрастает, и химическая связь не образуется. Ковалентная химическая связь может образовываться и при обобществлении электронов нескольких атомов. Например, в циклической молекуле бензола C_6H_6 связывающие электроны обобществлены между шестью атомами углерода. Кратность ковалентной химической связи (одинарная, двойная или тройная) определяется количеством пар обобществляемых электронов. В кристаллах ковалентная связь приводит к обобществлению электронов огромного количества атомов. Разделение химических связей на ионные и ковалентные в определённой степени условно, поскольку в большинстве молекул химические связи имеют смешанный характер.

В качестве ещё одного типа химической связи иногда выделяют координационную (донорно-акцепторную) связь, которая реализуется в координационных соединениях (комплексах атомов с молекулами, имеющими формально насыщенные связи). Для такого типа связи характерен переход электронной пары, локализованной на атоме-доноре, к атому-акцептору.

Водородная связь представляет собой промежуточный между валентным и невалентным межатомным взаимодействием тип связи и формируется между электроотрицательным атомом O, N или F и атомом водорода H, присоединённым к другому электроотрицательному атому (например, $\text{O}-\text{H}\dots\text{O}$). При формировании ковалентной связи $\text{O}-\text{H}$, $\text{N}-\text{H}$ и т. п. электронная плотность смещается от атома H к более электроотрицательному атому (O, N и т. п.). В результате этого положительно заряженный протон атома водорода может участвовать в образовании

связи с другим электроотрицательным атомом. Благодаря водородным связям молекулы объединяются в димеры и полимеры, которые могут иметь линейное, разветвленное или циклическое строение. Водородная связь может также объединять части одной и той же молекулы. Водородные связи играют важную роль в образовании жидкой воды и формировании структуры льда. Процессы растворения во многом обусловлены способностями веществ создавать водородные связи. Водородная связь проявляется в органических кристаллах, белках, полимерах и в живых организмах.

Теоретические исследования химических связей проводятся методами квантовой химии, а экспериментальные — методами химической кинетики, оптической спектроскопии, электронного парамагнитного и ядерного магнитного резонанса, электроно- и нейтронографии, рентгеноструктурного анализа.

Г.Ф. Стельмах, М.Б. Шундалов

Энциклопедия для школьников и студентов в 12 томах.

Том 5. Химия. Биология. Минск, Беларуская энцыклапедыя ім. П. Броўкі, 2016.