

Связывание атомов в молекулах определяется тем, как перекрываются их волновые функции.

Атомы объединяются в молекулы благодаря химическим связям. Причем участвуют в образовании этих связей электроны, находящиеся во внешнем слое этих атомов. Существует несколько теорий, описывающих процесс связывания. Одна из них — *теория валентных связей*, в соответствии с которой связи между атомами образуются, когда атомы обмениваются электронными парами из перекрывающихся орбиталей. Другая — теория молекулярных орбиталей.

Такого рода приблизительные теории полезны, поскольку мы получаем простой, интуитивно понятный способ представления физических процессов. С другой стороны, современные компьютеры дают нам возможность с высокой точностью вычислить энергии связи, однако такие вычисления ничуть не приближают нас к пониманию того, что же происходит, когда атомы соединяются. Роль теорий как раз в том и состоит, чтобы дать нам это понимание.

В основе теории молекулярных орбиталей лежит представление о том, что электронная орбиталь в атоме описывается *волновой функцией* (см. Уравнение Шрёдингера). Теория объясняет, как при протекании химической реакции атомные орбитали преобразуются в молекулярные. Подобно большинству известных нам типов волн, волновые функции электронов в орбиталях претерпевают интерференцию. Оказывается, орбитали в молекулах можно, с хорошим приближением, представить как результат интерференции волновых функций атомов.

Например, рассмотрим, что происходит при взаимодействии двух атомных орбиталей соседних атомов. Если в области перекрывания орбиталей волновые функции претерпевают конструктивную интерференцию, электроны большую часть времени проводят между ядрами, притягивая атомы друг к другу. С другой стороны, если интерференция в области перекрывания деструктивная, электронная плотность между ядрами равна нулю, и между атомами возникает результирующая сила отталкивания. Таким образом, две атомные орбитали объединяются с образованием двух молекулярных орбиталей: одна стремится связать атомы (связывающая молекулярная орбиталь), а другая — оттолкнуть их (разрыхляющая молекулярная орбиталь). И их взаимодействие определяет, будет ли образована стабильная молекула.

Чтобы понять, как работает эта модель, попробуем разобраться, почему водород

образует молекулу из двух атомов, а гелий — из одного. В образовании связи между двумя атомами водорода участвуют по одному электрону от каждого атома, а на низшей (связывающей) молекулярной орбитали как раз есть место для двух электронов. Электроны основное время находятся между ядрами, значит атомы притягиваются и молекула водорода может образоваться. У гелия же в образовании связи между двумя атомами участвуют четыре электрона, поэтому заняты как связывающая, так и разрыхляющая атомные орбитали. Численные вычисления показывают, что в этом случае будет преобладать эффект отталкивания, и, даже если молекулы гелия образуются, они будут крайне нестабильны. Поэтому молекула газа гелия состоит из одного атома.