

## Невалентная (физическая) связь

Потапов Алексей Алексеевич

(Дополнительное описание)

Наряду с кулоновскими силами взаимодействия всегда присутствуют относительно небольшие силы диполь-зарядовых взаимодействий. Существенным для понимания внутримолекулярных взаимодействий представляется электрическая конфигурация молекулы в модели кольца на оси молекулы. Ее особенность заключается в том, что по отношению к окружающим молекулам она проявляет себя как совокупность эффективных зарядов и дипольных моментов. Это означает, что определенность электронной конфигурации атомов и ионов в составе молекул предопределяет строгое пространственное распределение зарядов и электрических моментов. Именно они обуславливают механизм связывания атомов между собой. Вместе с этим, они проявляют себя и во взаимодействии с внешним окружением. Взаимодействия имеют чисто электрическую природу электрические заряды  $q$  и диполи  $p$  выступают в роли источников электрических полей  $E = \frac{q}{r}$  и  $E = \frac{p}{r^2}$  на относительно небольших расстояниях между микрочастицами (молекулами) их электрические поля перекрываются и обуславливают механизм электростатического взаимодействия между молекулами или их фрагментами. Эти взаимодействия носят универсальный характер и обнаруживаются у всех молекул (все молекулы при определенной температуре конденсируются). Можно ожидать, что аналогичные взаимодействия будут наблюдаться и между отдельными фрагментами, принадлежащими одной молекуле.

Данный вывод находится в полном соответствии с классическими представлениями об универсальном характере электростатических взаимодействий. Взаимное положение молекулы (или их фрагментов) устанавливается автоматически благодаря стремлению молекулярной системы к минимуму потенциальной энергии в соответствии с формулой  $u_{qp} = -\frac{qp}{r^2} \cos \varphi_1$ , для заряд-дипольной системы и  $u_{pp} = -\frac{p_1 p_2}{r^3} \cos \varphi_2$  – для диполь-дипольной системы, где  $\varphi_1$  – угол между направлением диполя  $p$  и линией связи между микрочастицами,  $\varphi_2$  – угол между направлениями диполей  $p_1$  и  $p_2$ . Равновесное состояние в системе достигается благодаря вращению выделенных фрагментов молекул относительно друг друга под действием вращательного момента  $M = p_1 E \sin \varphi$  механических сил, где  $E$  – напряженность электрического поля в центре диполя  $p_1$  создаваемого эффективным зарядом  $q$  или диполем  $p_2$ . Переход в равновесное состояние системы происходит автоматически путем самоорганизации. Противодействующими сближению молекулярных фрагментов выступают силы диполь-дипольного отталкивания. Уравнение энергетического баланса для заряд-дипольных систем имеют вид

$$u(r) = -\frac{pq}{r^2} \cos \varphi_1 + \frac{p_1 p_2}{r^3} \cos \varphi_2, \quad (1)$$

в котором первое слагаемое соответствует притягивательной ветви потенциальной функции  $u(r)$ , а второе – отталкивательной.

Благодаря разным показателям степени при  $r$ , функция  $u(r)$  имеет минимум энергии, свидетельствующий о наличии системы взаимодействующих фрагментов устойчивого состояния. Равновесному состоянию  $r=l$  соответствует энергия связи и эта энергия много меньше энергии валентного взаимодействия в полном соответствии с убывающим рядом мультипольного разложения энергии взаимодействия в ряд по обратным степеням межчастичных расстояний по (1). Равновесное расстояние  $l$  можно найти по стандартной методике, путем дифференцирования потенциальной функции по  $r$  и приравнивания полученного выражения нулю, так что

$$u'(r)|_{r=l} = +\frac{2pq}{r^3} - \frac{3p_1p_2}{r^4} = 0, \quad r=l,$$

откуда  $l = \frac{3}{2} \frac{p_1p_2}{pq}$ . С учетом данной формулы функцию  $u(r)$  можно представить в виде

$$u(r) = -\frac{pq}{r^2} \left( 1 - \frac{2}{3} \frac{l}{r} \right). \quad (2)$$

В равновесном состоянии

$$u(r)_{r=l} = u_0 = -\frac{pq}{3l^2}. \quad (3)$$

Более подробную информацию о природе и механизме образования невалентной связи можно получить в монографиях:

1. Потапов А.А. Ренессанс классического атома. – М.: Издательский Дом “Наука”: LAP LAMBERT Academic Publishing, 2011. – 444 с.
2. Потапов А.А. Природа и механизм связывания атомов(в печати).

© Потапов Алексей Алексеевич, 2012