

Понятие «локализованная связь» употребляется здесь в несколько ином смысле, чем в МО-методе.

Для кристаллической решетки имеет место такое же различие между локализованной и делокализованной связью. Здесь, конечно, невозможно выполнить количественные расчеты упомянутого выше типа для делокализованной связи. Число возможных конкурирующих валентных структур слишком велико. Можно, однако, сразу указать на фундаментальное различие между двумя типами связи. Локализованные связи будут предпочтительнее, когда число валентных электронов, принадлежащих атому, равно числу его ближайших соседей. В этом случае упорядочение электронов парами по связям однозначно. Электроны связаны на фиксированных местах в решетке и не могут следовать слабым внешним силам. Твердые тела, к которым это относится, являются *изоляторами* или полупроводниками. Примером служит алмаз, в котором четыре валентных электрона атомов углерода локализованы в sp^3 -гибридных состояниях.

Делокализованные связи встречаются тогда, когда число валентных электронов значительно меньше числа ближайших соседей (например, Na с одним валентным электроном на атом, но с 12-ю ближайшими соседями). Делокализация вызывает тогда легкую подвижность электронов, так что такие твердые тела являются *металлами*.

Помимо *металлической связи* есть другие важные типы связи — *ковалентная связь* и *ионная связь*. Оба последних типа связи являются предельными случаями локализованной связи, уже упоминавшейся в § 2. Более подробно мы рассмотрим эти типы связи в следующих параграфах.

Мы заканчиваем этот параграф следующим предостережением. Для описания химической связи мы ввели такие понятия, как локализация и делокализация, атомная орбиталь и молекулярная орбиталь, полярность и поляриность, связывающие и антисвязывающие состояния. С другими понятиями (резонанс, электроотрицательность и пр.) мы встретимся в следующем параграфе. Все эти понятия являются вспомогательными, возникающими из-за того, что мы выбрали в качестве пробных функций, которые предлагается использовать в вариационном методе для приближенного решения уравнения Шредингера нашей задачи, атомные орбитали (т. е. собственные функции *свободного атома*). Следует иметь в виду, что в молекуле или твердом теле не существует ни атомных орбиталей, ни валентных состояний и что валентные структуры, из которых образуются пробные функции для нелокализованной связи, отдельно не реализуются и, следовательно, не могут быть измерены.

Если, однако, учитывать опасность переоценки этих вспомогательных понятий, то они могут быть весьма полезны для качественных оценок, для систематического сопоставления свойств твердых тел и для классификации различных типов связи.