

МО

Лекция 3

МО ЛКАО

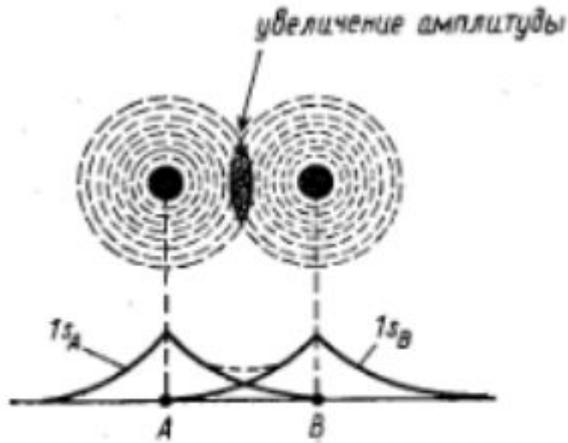


Рис. 1.3. Перекрывание АО, ведущее

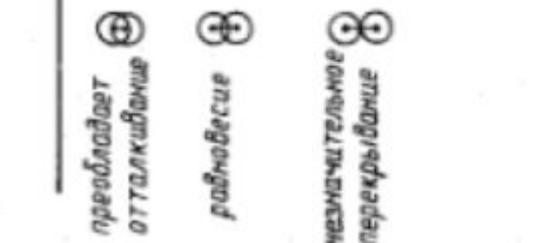
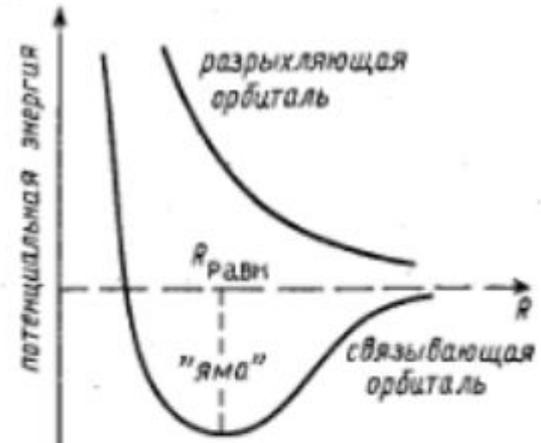


Рис. 1.4. Кривые потенциальной энергии для иона H_2^+ .

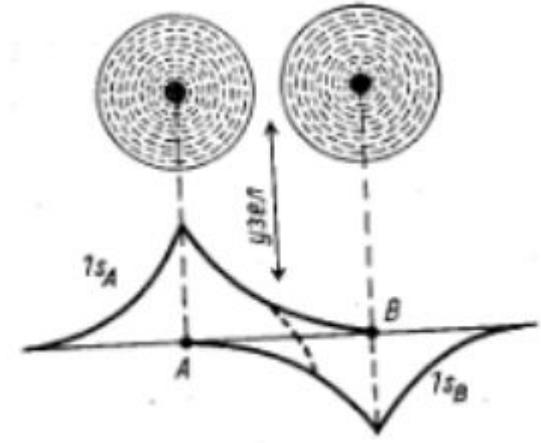


Рис. 1.5. Образование антисвязывающей (разрыхляющей) молекулярной орбитали

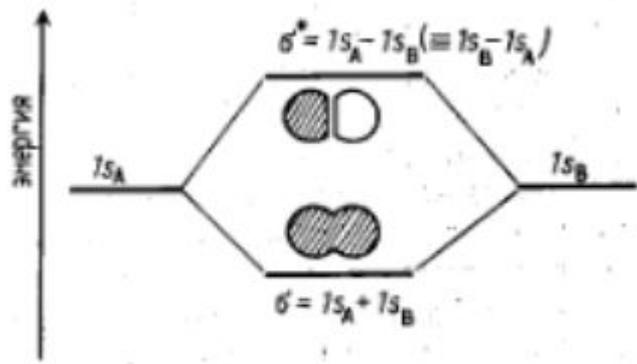
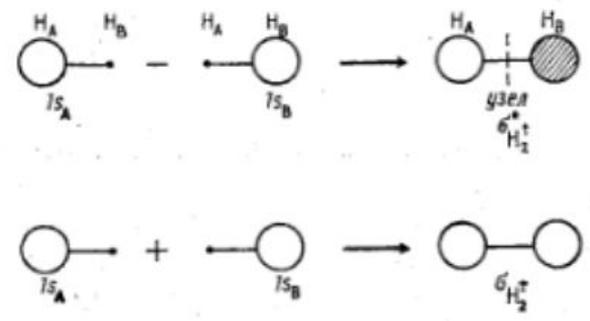
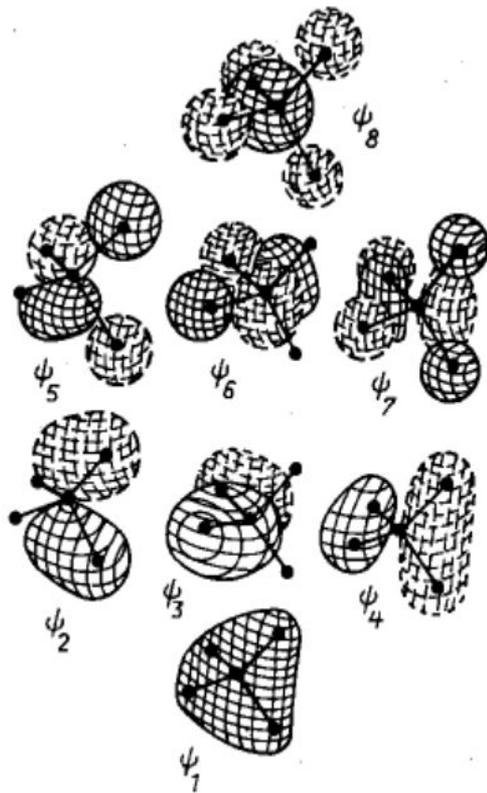


Рис. 1.6. Диаграмма энергетических уровней МО, образованных из 1s-орбиталей



МЕТАН CH_4



разрыхляющие

связывающие

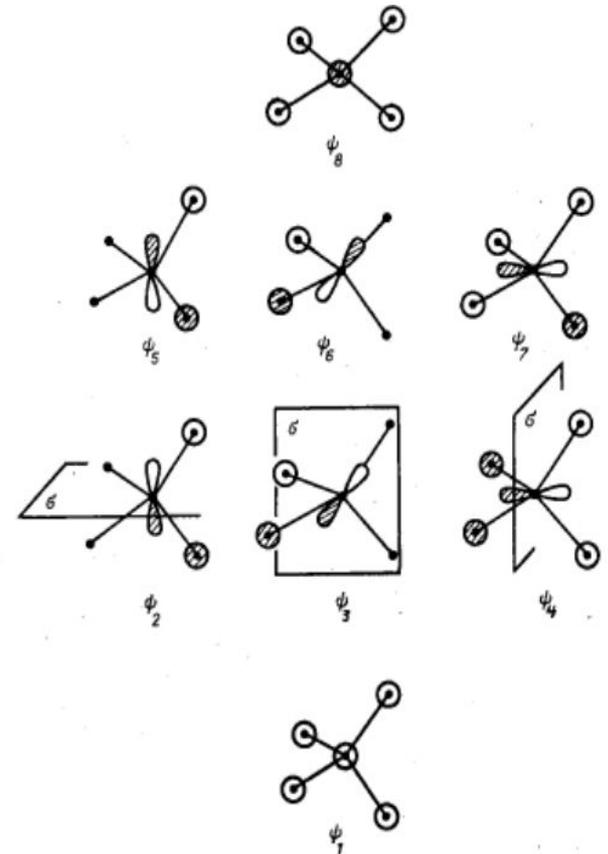
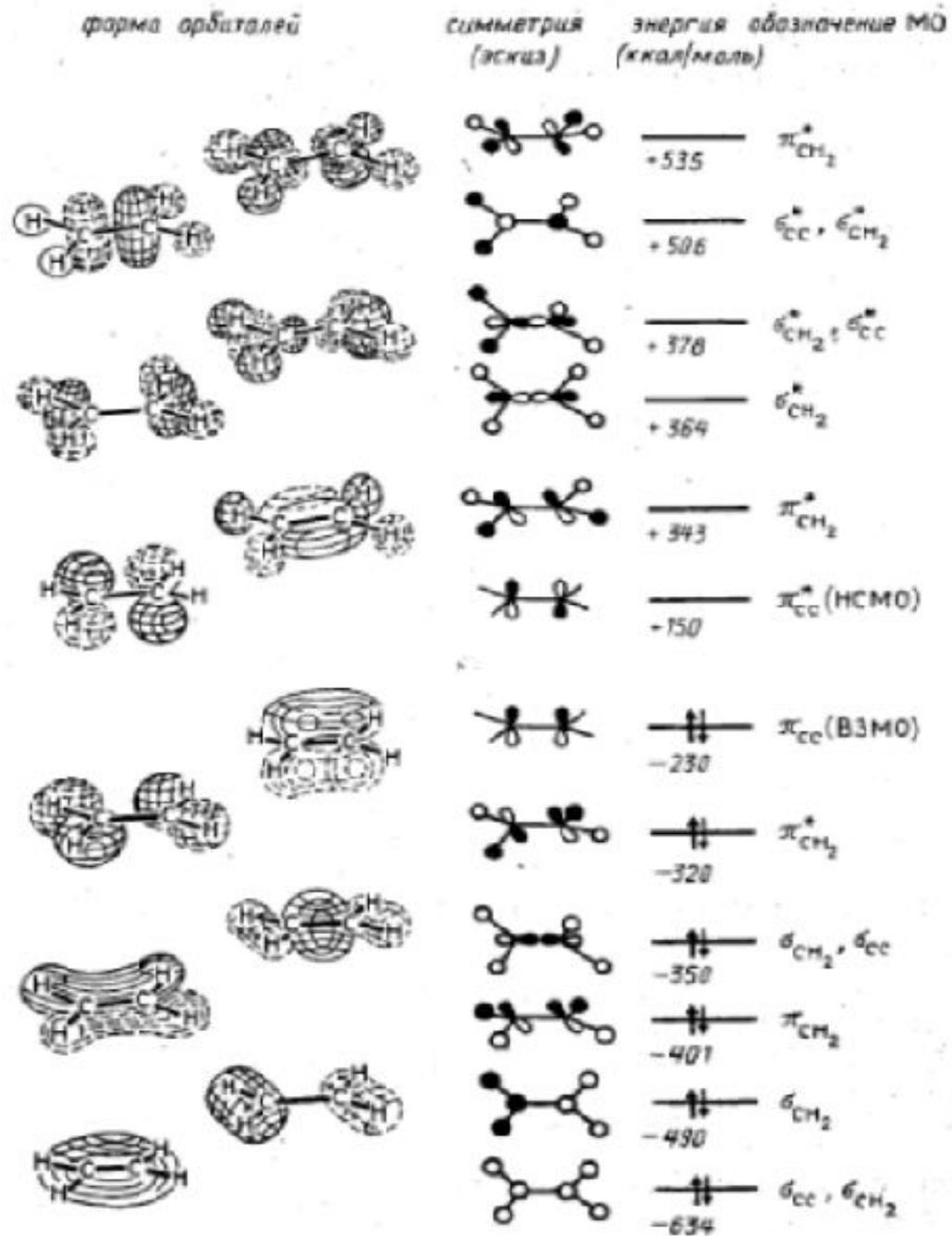


Рис. 1.14. Форма канонических МО молекулы CH_4 . Сплошные и пунктирные линии отражают разные знаки волновой функции. Приведены вычисленные значения энергии орбиталей. Знак «минус» означает выигрыш энергии при заселении орбитали электроном, а знак «плюс» — проигрыш энергии

Рис. 1.15. Схематические изображения МО молекулы CH_4 , показывающие симметрию и узловые свойства

Этилен C_2H_4



Ацетилен C_2H_2

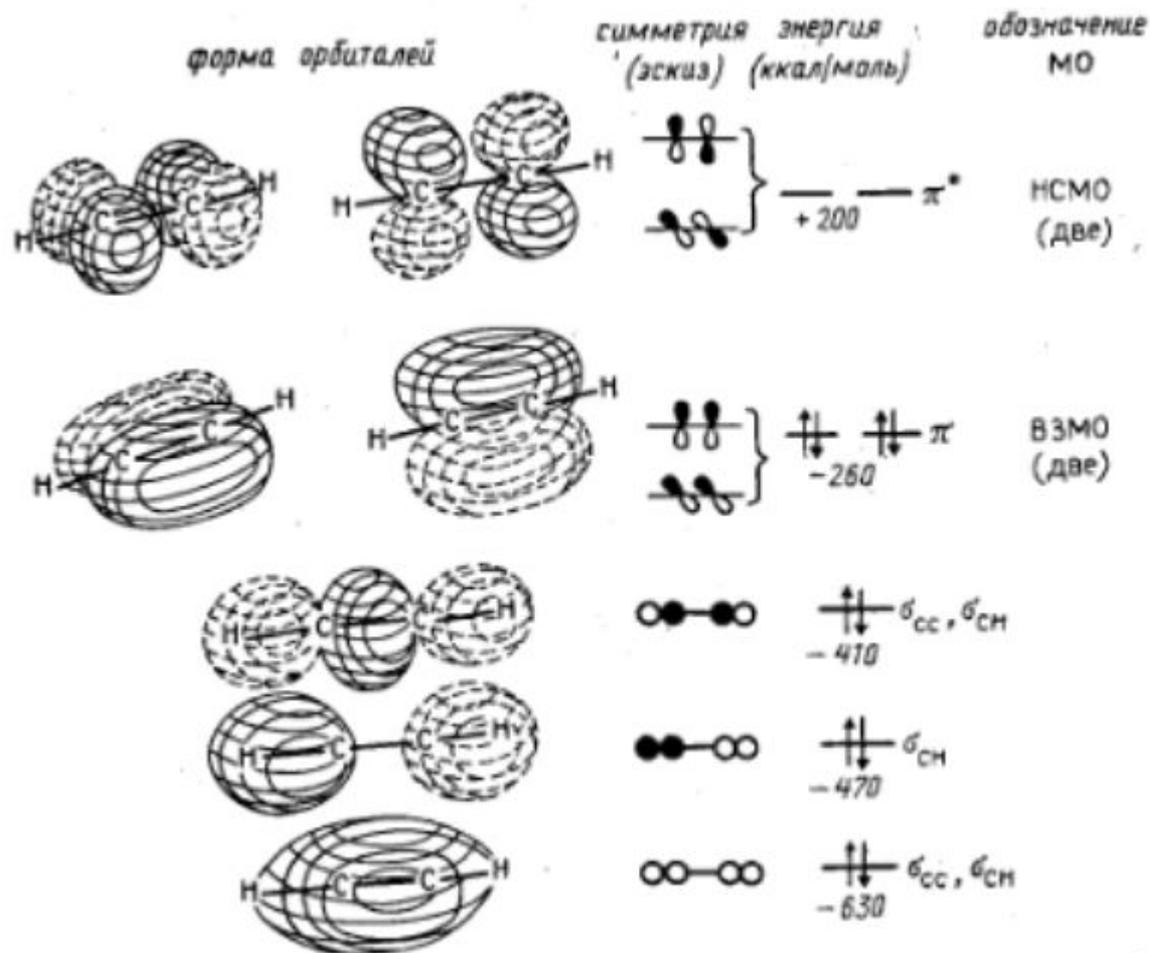


Рис. 1.20. МО молекулы ацетилена. Три высшие разрыхляющие орбитали не показаны

Аллильный катион, радикал, анион

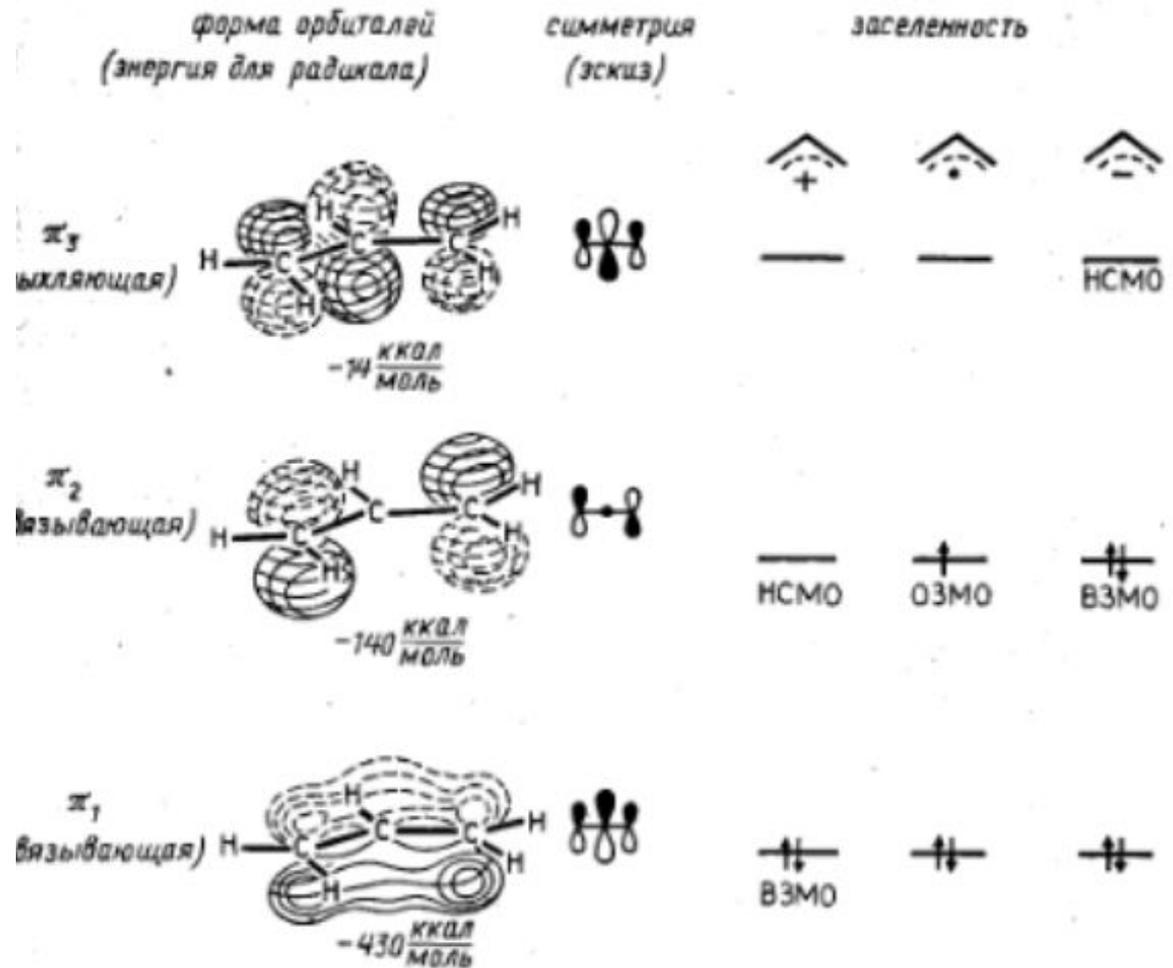


Рис. 1.21. π -МО аллильного катиона, радикала и аниона

Бутадиен

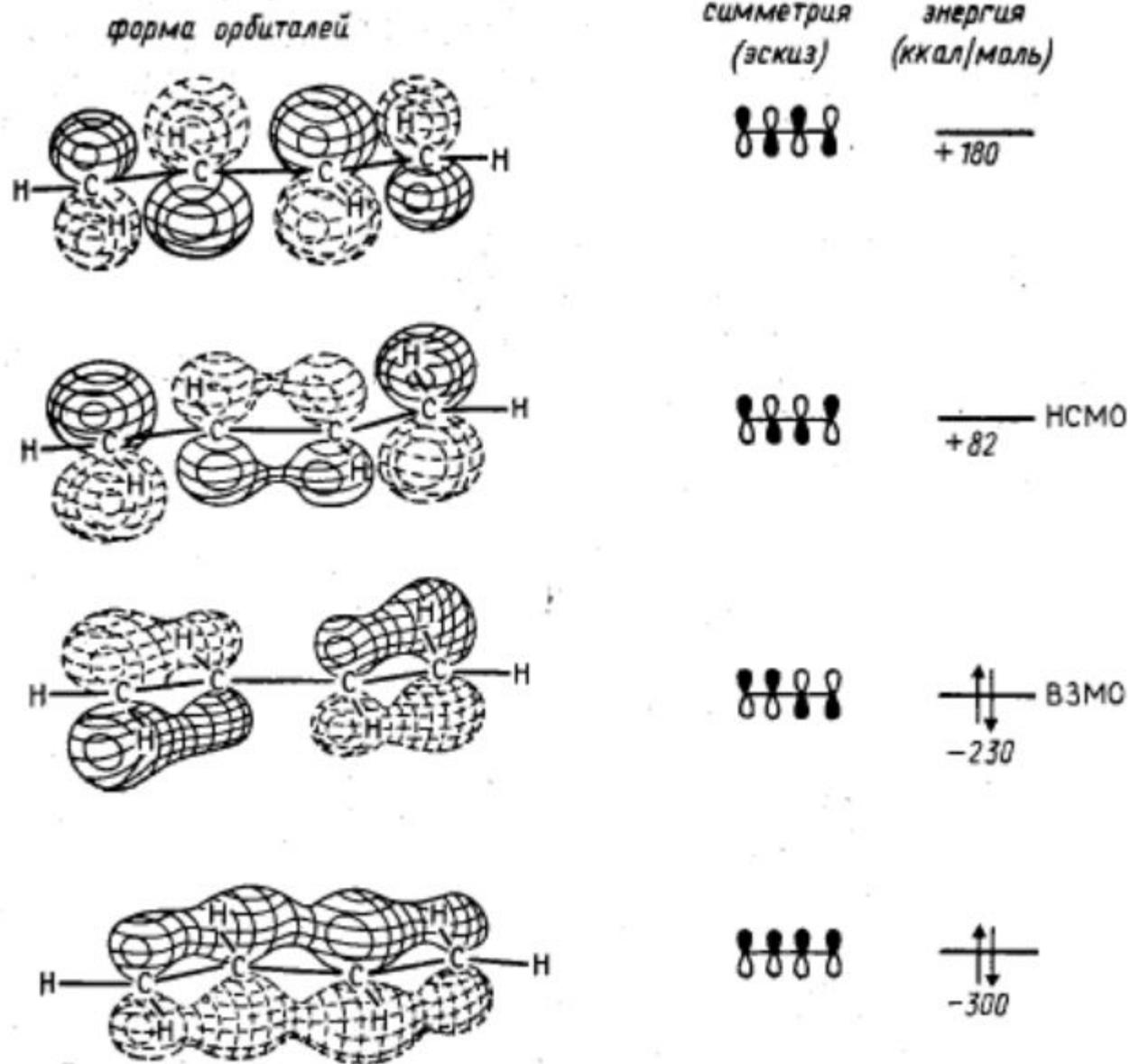


Рис. 1.22. π -МО для молекулы бутадиена

Строение бензола (аннулена-6)

