

Метод молекулярных орбиталей

*(Линейная комбинация
атомных орбиталей)*

ММО (ЛКАО)

Электроны принадлежат молекуле в целом. Вместо атомных орбиталей рассматриваются молекулярные орбитали.

В образовании химической связи могут участвовать как пара, так и один электрон.

Состояние электронов в молекулах соответствует принципам минимальной энергии, Паули и Гунда.

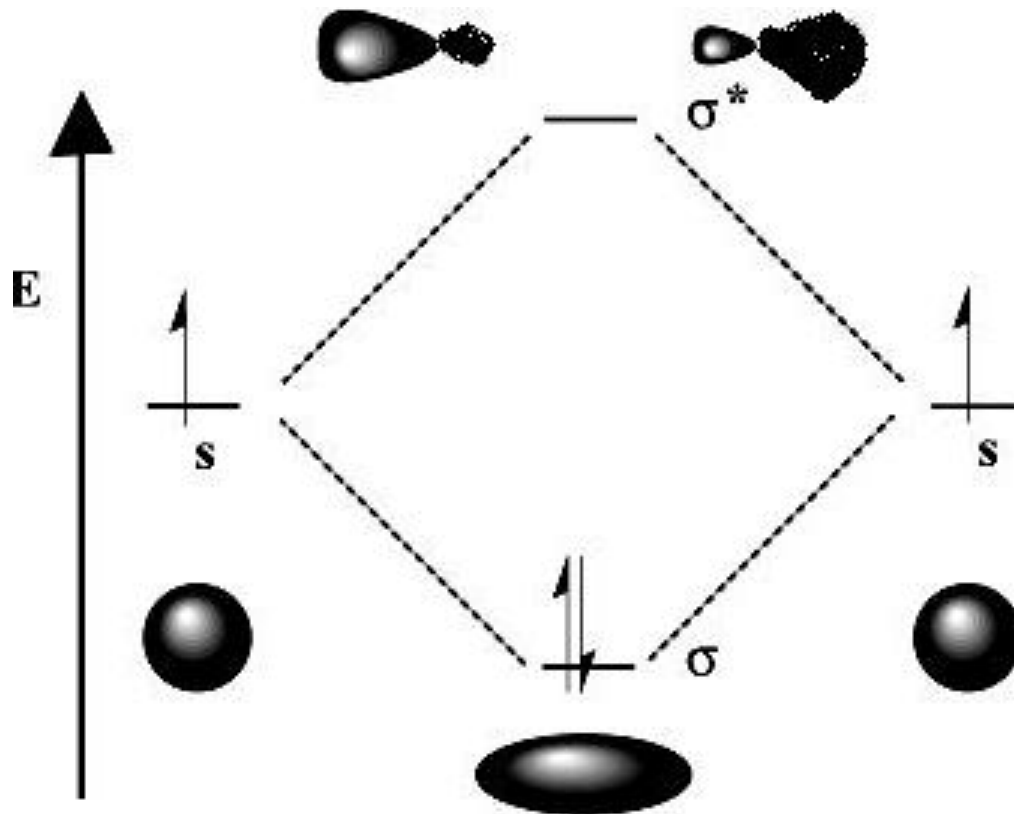
Молекулярные орбитали строятся из атомных орбиталей путем линейных комбинаций, т. е. путем сложения и вычитания волновых функций. Из N атомных получают N молекулярных орбиталей.

При ЛКАО форму молекулярных орбиталей можно предвидеть, зная форму атомных орбиталей. Во втором периоде валентными электронами являются только



Образование

$\sigma_s^{св.}$ И σ_s^*

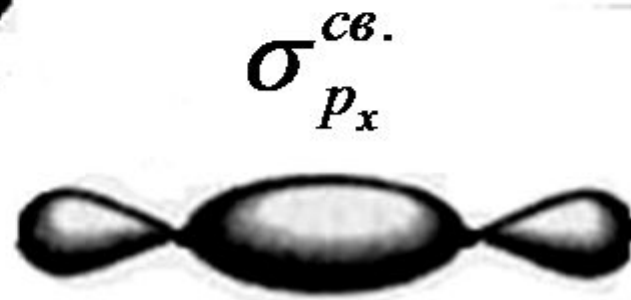
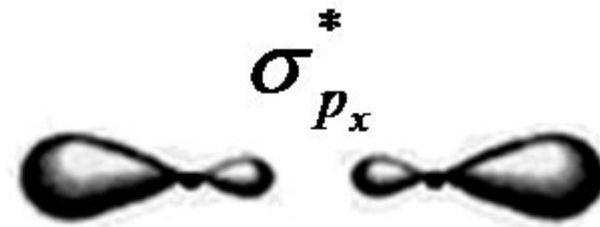
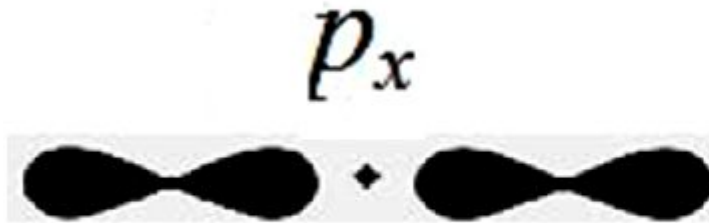


Образование

$\sigma^{св.}$
 p_x

и

σ^*
 p_x

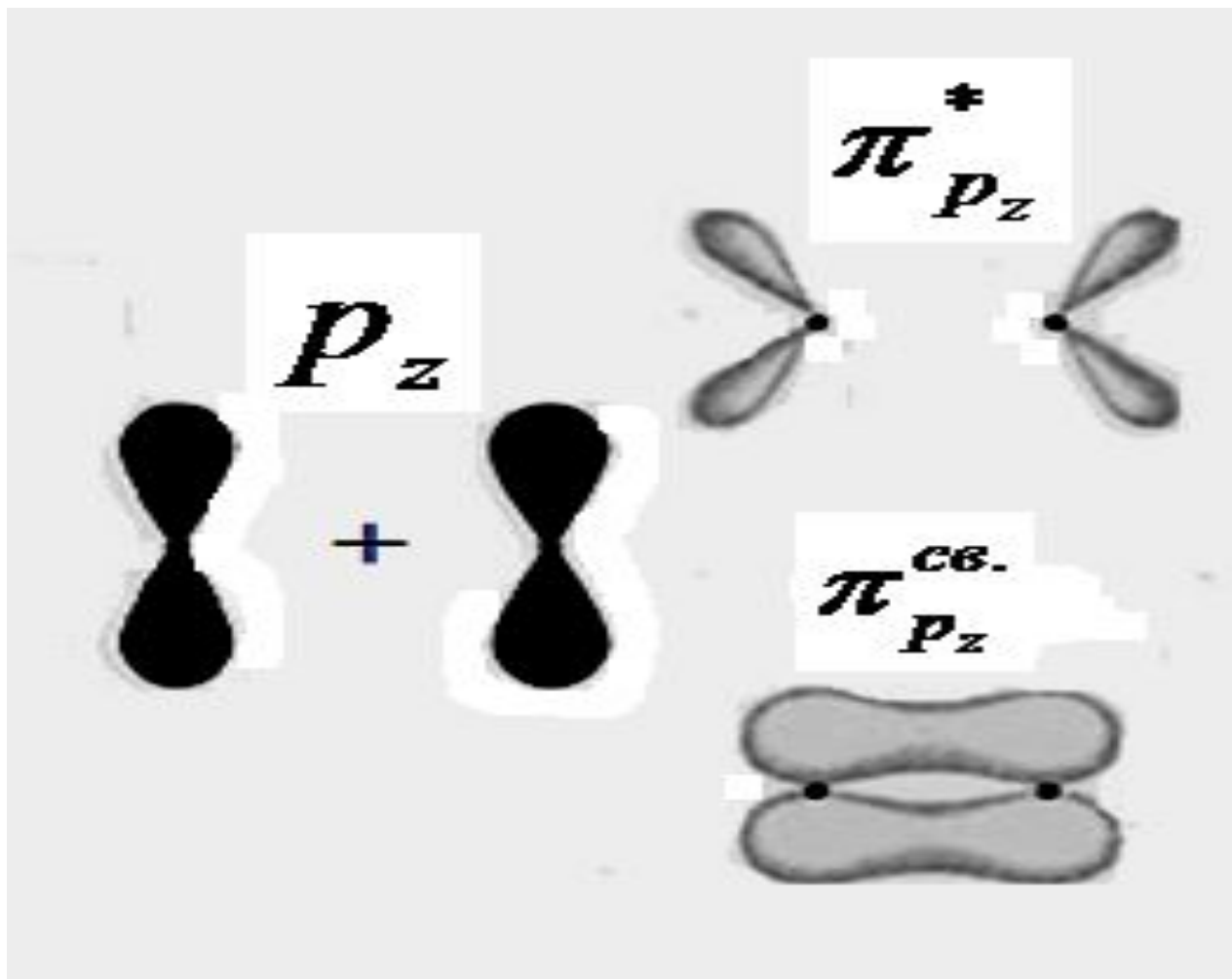


Образование

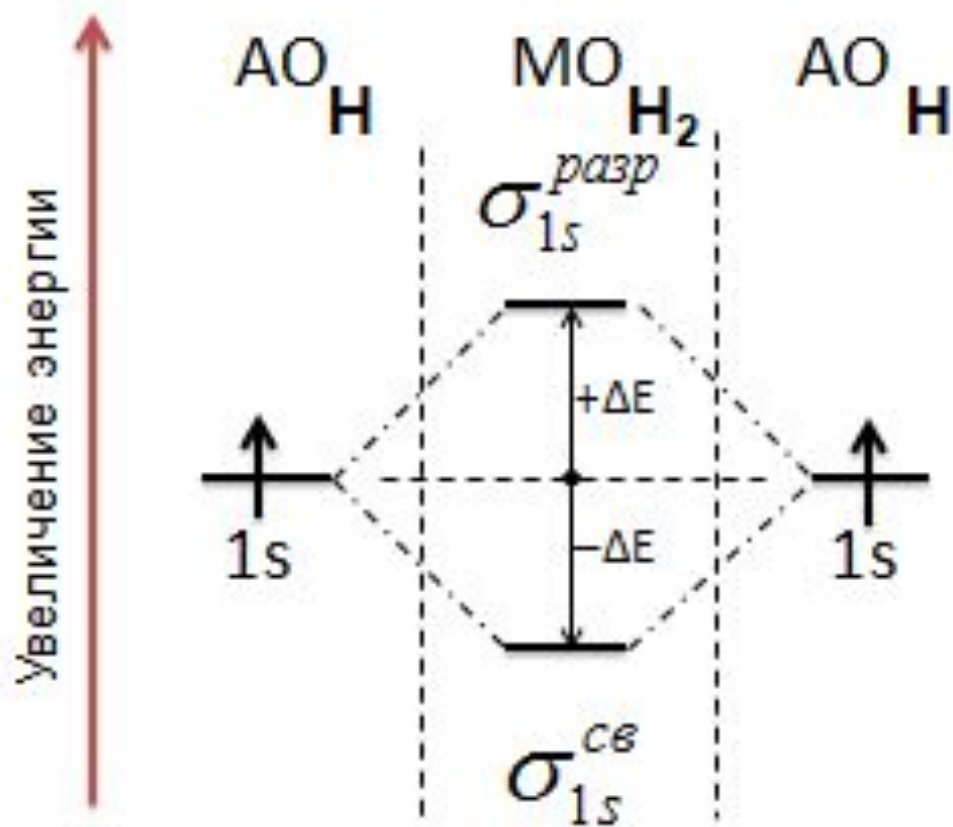
$\pi_{p_z}^{св.}$

и

$\pi_{p_z}^*$



Из двух исходных АО получают две молекулярные орбитали: одну с меньшей энергией –связывающую $\sigma^{св.}$ и другую с большей энергией – разрыхляющую $\sigma^{разр.}$.

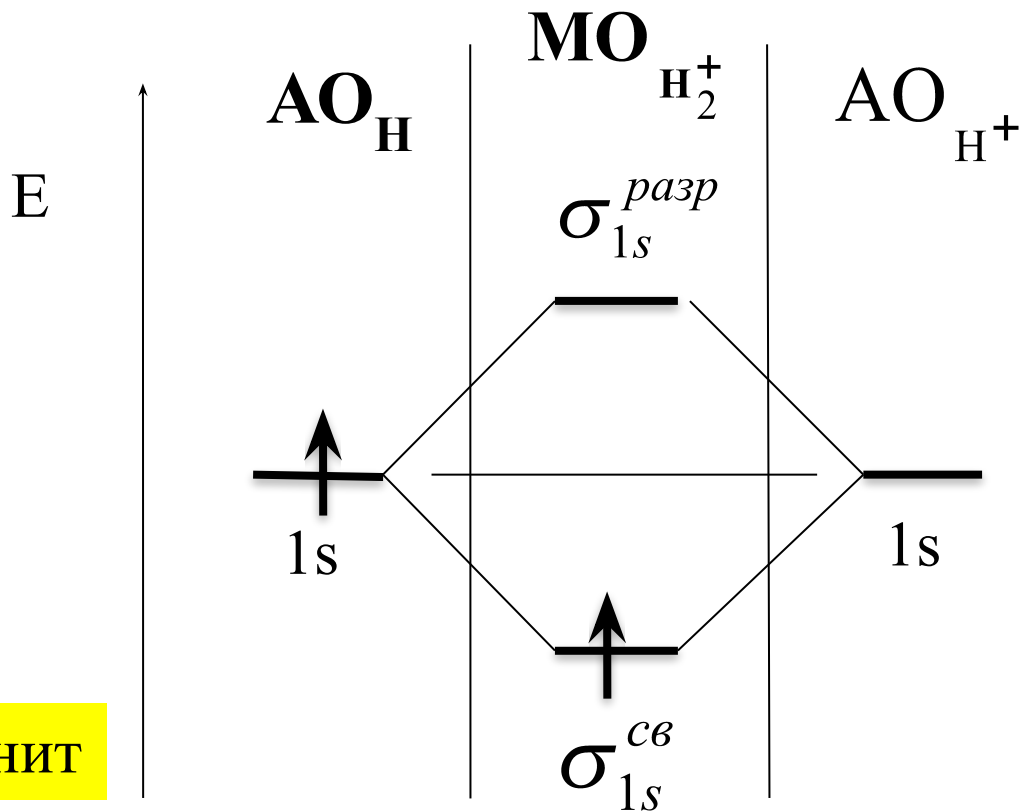




$$n_{\text{связи}} = \frac{N_{\text{связ}} - N_{\text{разр}}}{2}$$

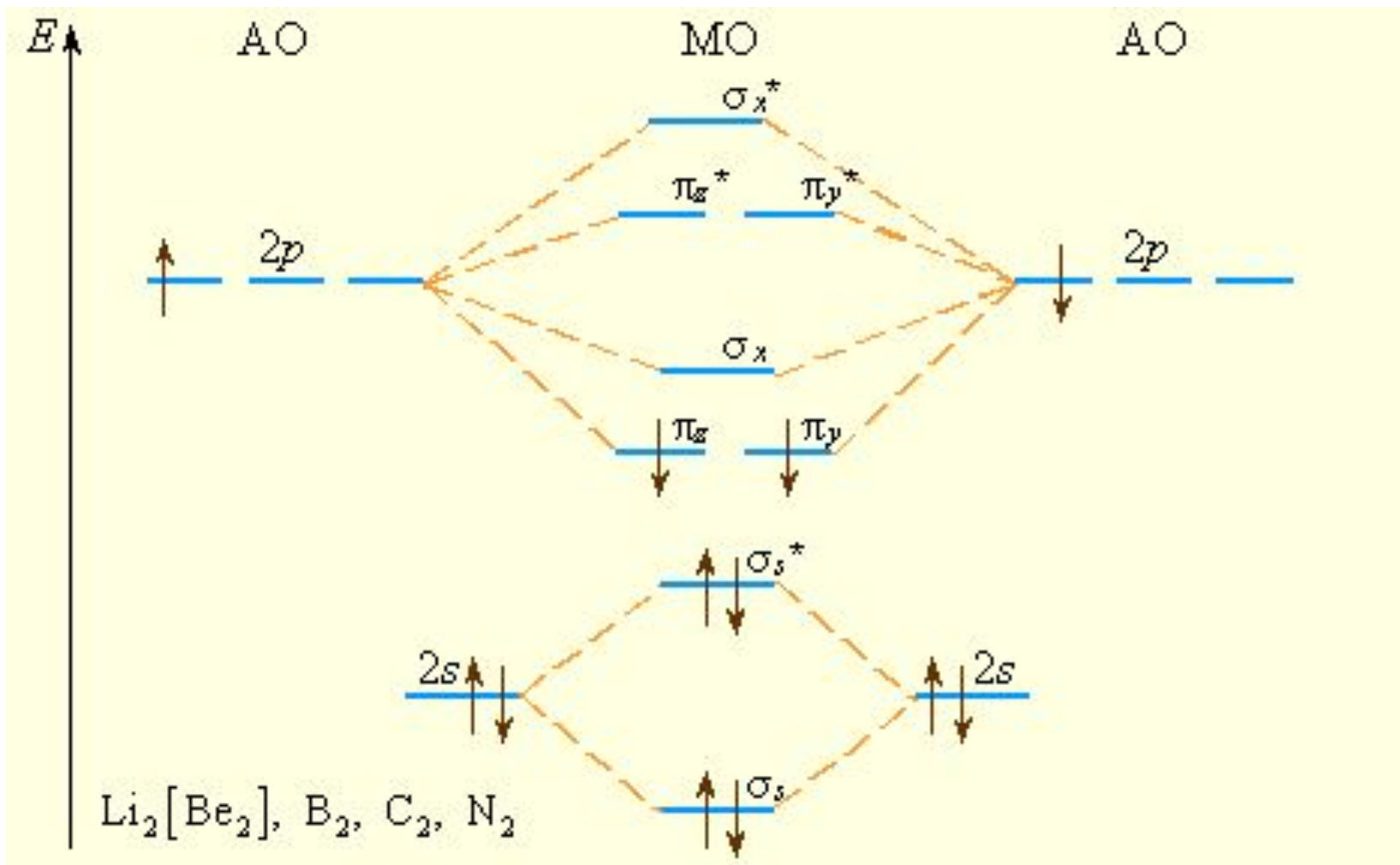
$$n_{\text{H}_2} = \frac{2 - 0}{2} = 1$$

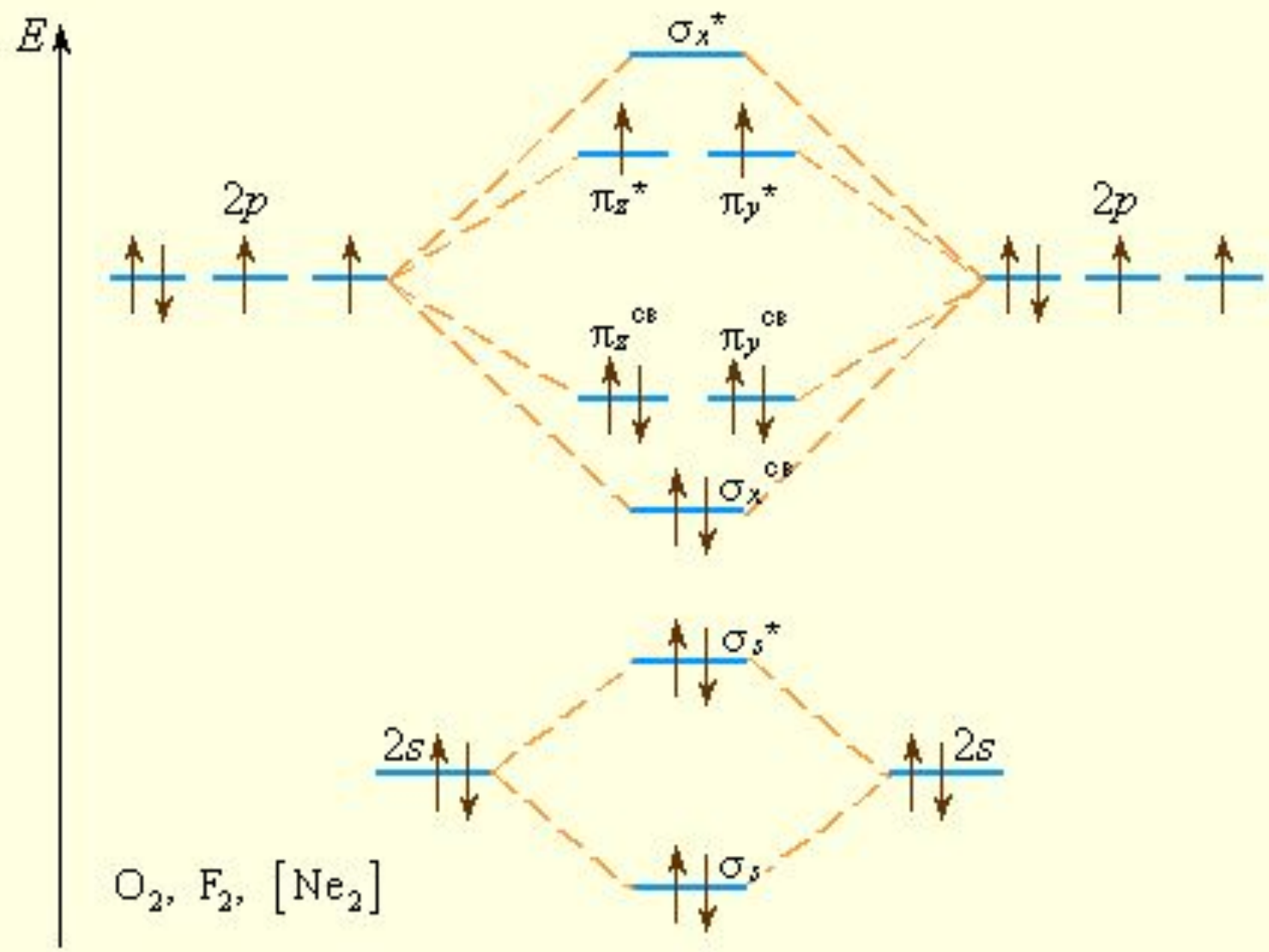
Парамагнит



$$n = \frac{1-0}{2} = 1/2$$

Энергетическая диаграмма
молекулярного иона водорода H_2^+

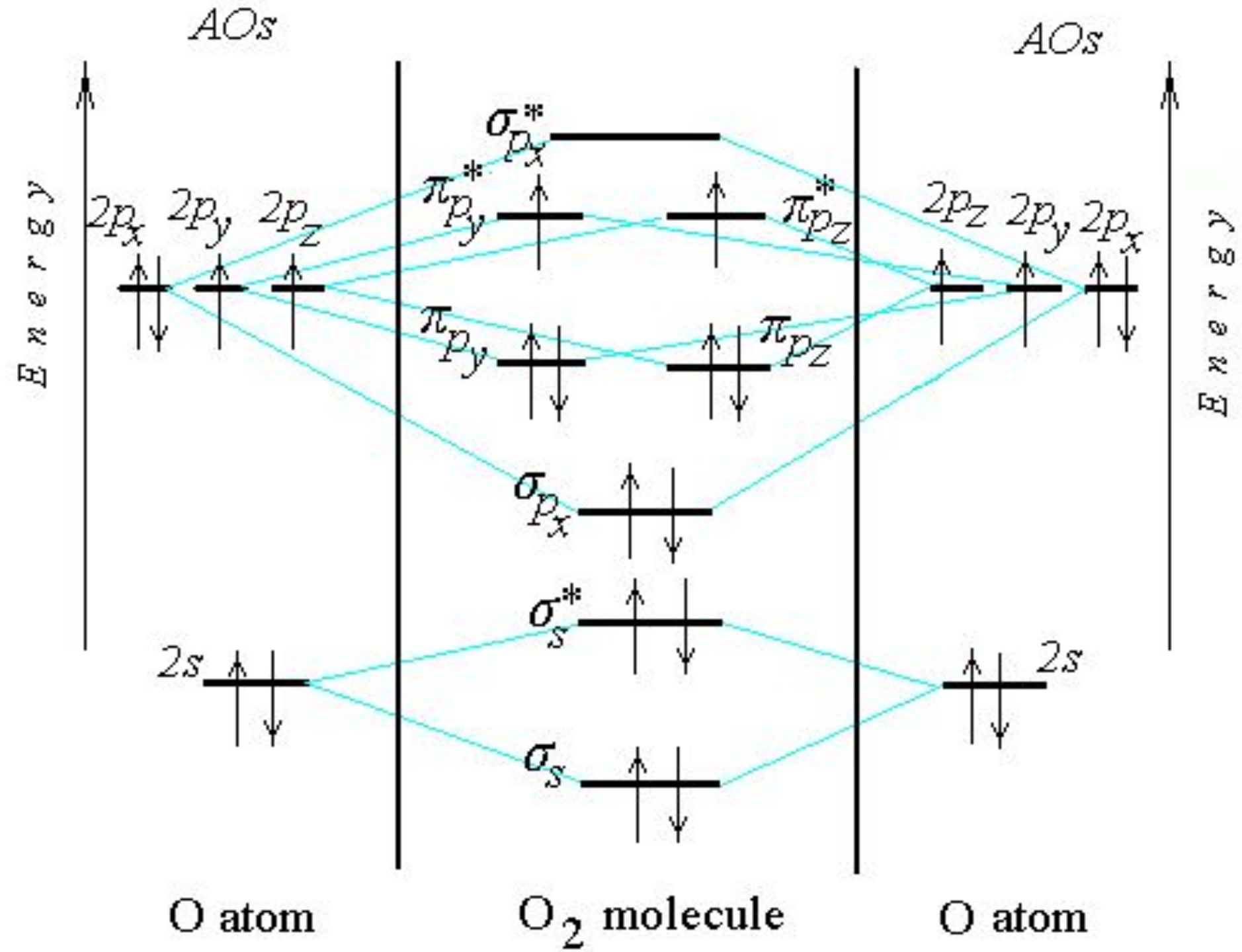




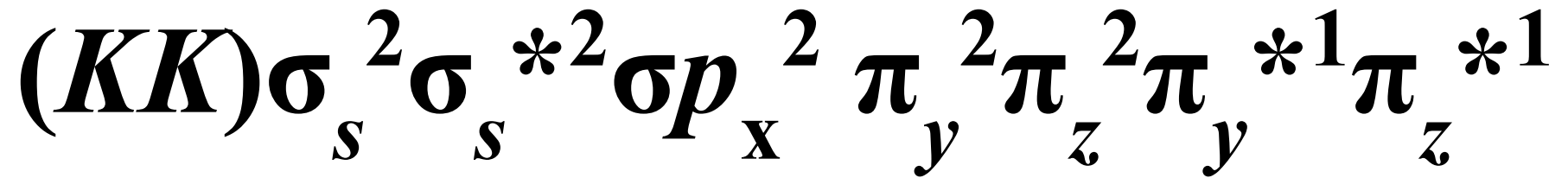
Изоэлектронные частицы



имеют одинаковый набор МО,
одинаковую энергетическую
последовательность,
заселенность электронами и
одинаковый порядок связи



O_2



Обозначение (KK) относится к внутренним электронам в O_2

N_2

