

Е.А.Бөкетов атындағы Қарағанды университеті
Химия факультеті

Молекулалық орбиталдың негіздері

ТФП 315

Жетпіс Мақсат

- ▶ Молекула ядролар мен электрондардан тұратын тұтас жүйе деп қарап, орбитальдарында электрондар теориясы атомдарға қолданылатын кванттық механиканың заңдылықтарын күрделірек жүйе–молекулаларға қолданылады. Әрбір элементтің атомы бір ядродан тұрады, ал атомдардан түзілген молекула көп ядродан тұрады. Сондықтан молекуланың орбитальдарындағы электрондарға көп ядролар өрісі әсер ететіндіктен атомдардан молекула түзілу кезінде жүйенің энергиясы азаяды.
- ▶ Атомдардағы сияқты әрбір молекулалық орбитальға квант сандарының белгілі бір мәндері сәйкес келеді. Атомдық орбитальдар s, p, d, f әріптерімен белгіленетіні сияқты молекулалық орбитальдар σ, π, δ, ν әріптерімен белгіленеді.

- ▶ Молекулалық орбитальдар үш түрге бөлінеді: *байланыстырушы орбитальдар* энергиясы оларды құрған атомдық орбитальдардың энергиясынан төмен және осылайша молекуланы ұстап тұратын химиялық байланыстарға ықпал етеді; *антибонды орбитальдар* энергиясы олардың құрамына кіретін атомдық орбитальдардың энергиясынан жоғары, сондықтан молекуланың байланысуына қарсы және *байланыссыз орбитальдар* атомдар орбитальдарының энергиясымен бірдей, сондықтан молекуланың байланысына ешқандай әсер етпейді.

- ▶ Молекулалардың кеңістіктегі құрылысын түсіндіру үшін [Л.Полинг](#) енгізген атомдық орбитальдардың будандасуы туралы түсінікті пайдаланады. Будандасу, гибридтену деп түрпішіні және электрондық бұл энергиясы бойынша бірдей емесерді түрпішіні мен бұлт энергиясы бойынша бірдей жағдайға қайта құру процесін айтады. Мұндай орбиталдарды буданды деп те атайды. Будандық орбитальдар саны бастапқы орбитальдар санына тең, ал түрпішіні өзгешелеу.
- ▶ Будандық орбитальдағы электрондық тығыздылық ядродан басқа жаққа ығысады. сондықтан басқа атомның атомдық орбиталімен әрекеттескен кезде максималды қайта жабу жүреді. Байланыс энергиясының бұл жоғарылауы будандық орбитальдың түзілуіне керекті энергияны теңестіреді. Нәтижеінде будандық орбитальдар түзген химиялық байлансытар беріктеу, ал алынған молекулалар берік болады.

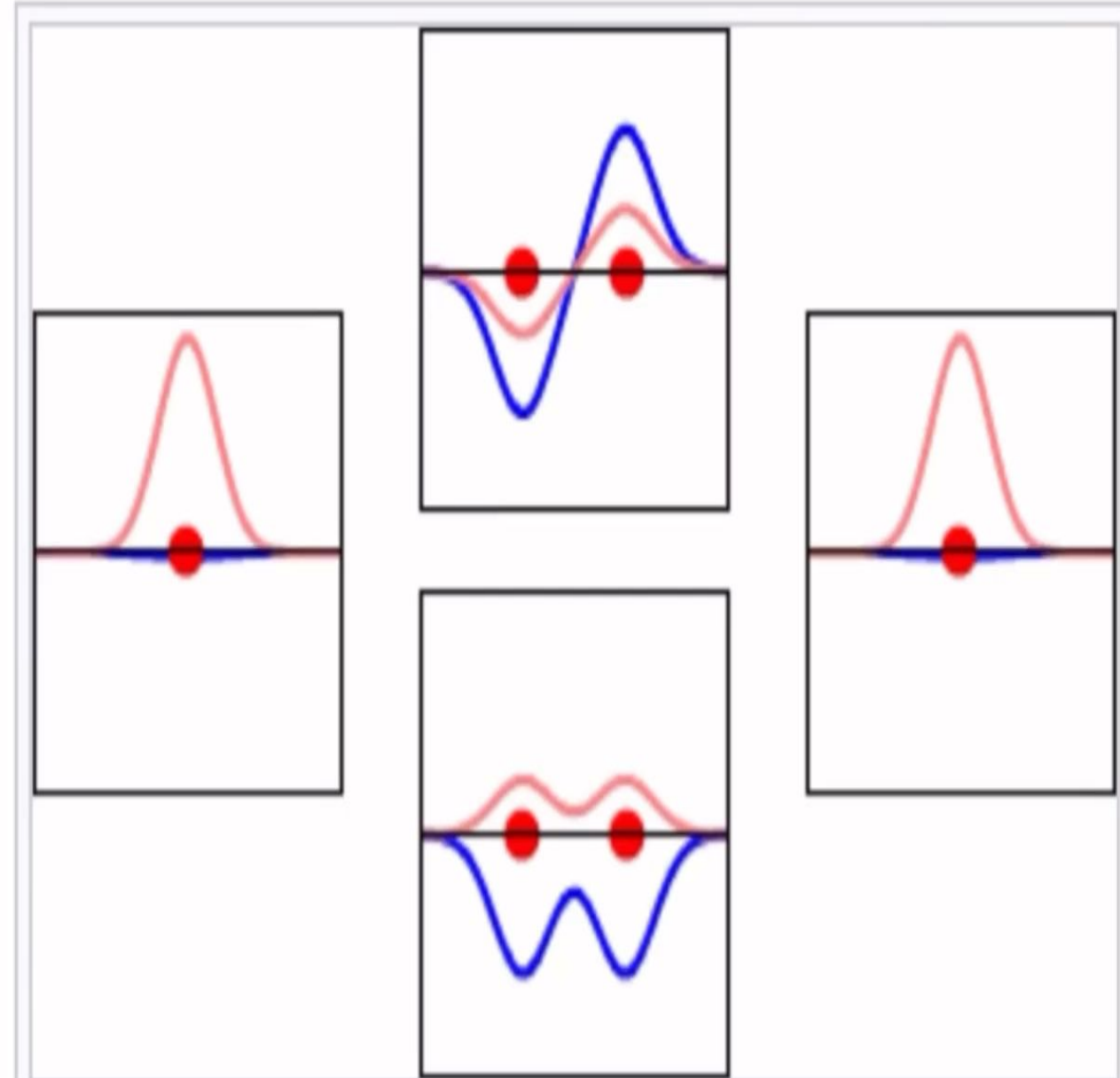
Молекулалық орбиталдың түзілуі

- ▶ Молекулалық орбитальдар арасындағы өзара әрекеттесулерден туындайды атомдық орбитальдар, егер оған симметрия болса рұқсат етіледі (бастап анықталады топтық теория) атомдық орбитальдар бір-бірімен үйлесімді. Атомдық орбиталық өзара әрекеттесу тиімділігі қабаттасу (екі орбитальдың бір-бірімен қаншалықты сындарлы өзара әрекеттесуінің өлшемі), егер атомдық орбитальдар энергиясы жағынан жақын болса, маңызды. Сонымен, түзілген молекулалық орбитальдар саны молекуланы құру үшін біріктірілген атомдардағы атомдық орбитальдар санына тең болуы керек.

- ▶ Молекулалық орбитальдарды алғаш енгізген Фридрих Хунд және Роберт С.Мулликен 1927 және 1928 жылдары. Атомдық орбитальдардың сызықтық комбинациясы немесе «LCAO» жуықтауын молекулалық орбитальдарға 1929 жылы енгізген Сэр Джон Леннард-Джонс. Оның электронды құрылымын қалай алуға болатындығы туралы оның алғашқы мақаласы фтор және оттегі кванттық принциптерден алынған молекулалар. Молекулалық орбиталық теорияға бұл сапалы көзқарас заманауи бастаманың бөлігі болып табылады кванттық химия. Молекуланы құрайтын атомдар арасындағы байланыс кезінде пайда болатын молекулалық орбитальдарды бағалау үшін атомдық орбитальдардың (LCAO) сызықтық комбинацияларын қолдануға болады.

Функциясы

Электрон толқындық функциялар үшін 1s орбиталық жалғыз сутегі атомының (сол жақта және оң жақта) және H байланыстырушы (төменгі) және антибондентті (жоғарғы) молекулалық орбитальдарының₂ молекула. **Нақты бөлігі** толқындық функцияның көк қисығы, ал **ойдан шығарылған бөлік** бұл қызыл қисық. Қызыл нүктелер ядролардың орналасуын белгілейді. Электрондық толқындық функция тербеліске сәйкес келеді Шредингердің толқындық теңдеуі, ал орбитальдар оның тұрақты толқындар. Тұрақты толқын жиілігі орбитаның кинетикалық энергиясына пропорционалды. (Бұл сюжет үш өлшемді жүйе арқылы бір өлшемді кесінді.)



Иондық байланыс

- ▶ **Иондық байланыстың бірінші теориясын 1916ж.немісғалымы Коссель ұсынды.Оның теориясы бойынша иондық байланыс қарама-қарсы зарядталған иондардың электростатикалық тартылысуынан болады.Иондық байланыс қарама-қарсы зарядталған иондардың кулон күштері арқылы тартылысу ы нәттижесінде түзіледі.Ал кулондық күштер қанықпайтын күштер,демек иондық байланыс қанықпаған байланыс.Иондық байланыстың кесімді бағыты жоқ, бағыттылық көрсетпейді.иондық байланыс қарама-қарсы зарядталған иондардың электростатикалық күштер арқылы тартылысуынан болады.Металдардың сыртқы валенттік электрондары барлық металдарға бірдей тең таралған,яғни ұжымдық боп саналады.Металдардың оң зарядты иондары ортақ электрон бұлттарымен қоршалған және байланысқан,байланыстың мұндай түрі металдық деп аталады.**

Сандық тәсіл

- ▶ Молекуланың сандық мәндерін алу үшін энергетикалық деңгейлер, сол сияқты молекулалық орбитальдар болуы керек өзара әрекеттесу (CI) кеңеюі жылдам жаққа қарай жақындайды толық CI шектеу. Мұндай функцияларды алудың ең кең тараған әдісі болып табылады Хартри-Фок әдісі, ол молекулалық орбитальдарды былайша өрнектейді өзіндік функциялар туралы Фок операторы. Әдетте бұл мәселені молекулалық орбитальдарды сызықтық комбинациялар ретінде кеңейту арқылы шешеді Гаусс функциялары орталықтандырылған атом ядролары (қараңыз атомдық орбитальдардың сызықтық комбинациясы және базалық жиынтық (химия)). Осылардың коэффициенттерінің теңдеуі сызықтық комбинациялар жалпыланған болып табылады өзіндік құндылық ретінде белгілі теңдеу Ротаан теңдеулері, олар шын мәнінде Хартри-Фок теңдеуінің нақты көрінісі болып табылады. MO-дің кванттық химиялық есептеулерін жүргізуге болатын бірқатар бағдарламалар бар, соның ішінде Спартан және HyperChem.

Назарларыңызға
Рахмет!

