



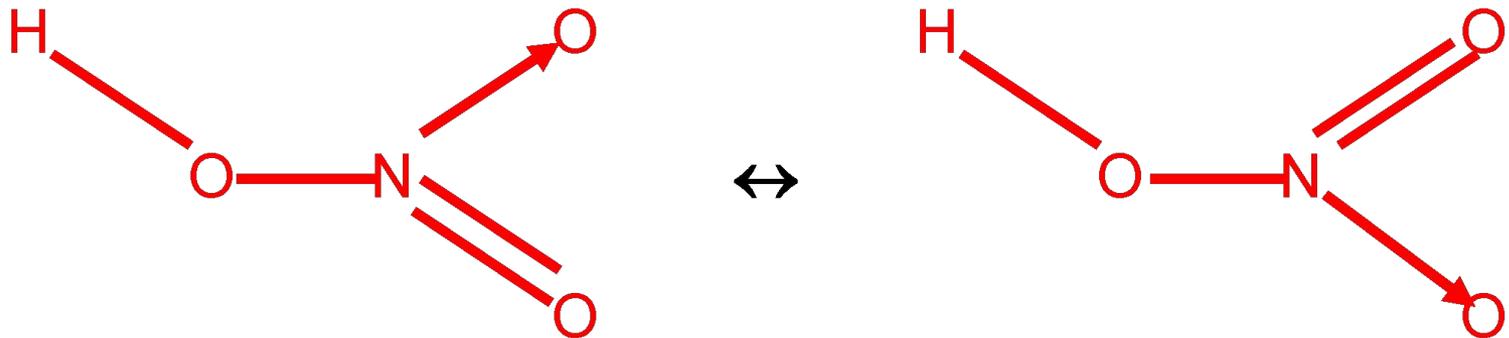
**Метод молекулярных
орбиталей**

Ограничения метода ВС

- азотная кислота, бензол, озон???



**наложение валентных схем или
резонансные структуры**



Метод МО

(Малликен, Хунд):

- молекула – совокупность ядер и электронов,
- каждый электрон движется в поле остальных электронов и ядер.

(связь многоцентровая, многоэлектронная)

ЛКАО

- $\psi(\text{МО})_{\text{связ}} = C_1\psi(\text{АО}_1) + C_2\psi(\text{АО}_2)$
- $\psi(\text{МО})_{\text{разр}} = C_3\psi(\text{АО}_1) - C_4\psi(\text{АО}_2)$
- Энергии АО близки $\Rightarrow C_1$ и C_2 близки \Rightarrow максимальное перекрывание, снижение энергии связывающих МО
- Энергии АО сильно различаются \Rightarrow несвязывающие МО

Принципы метода МО

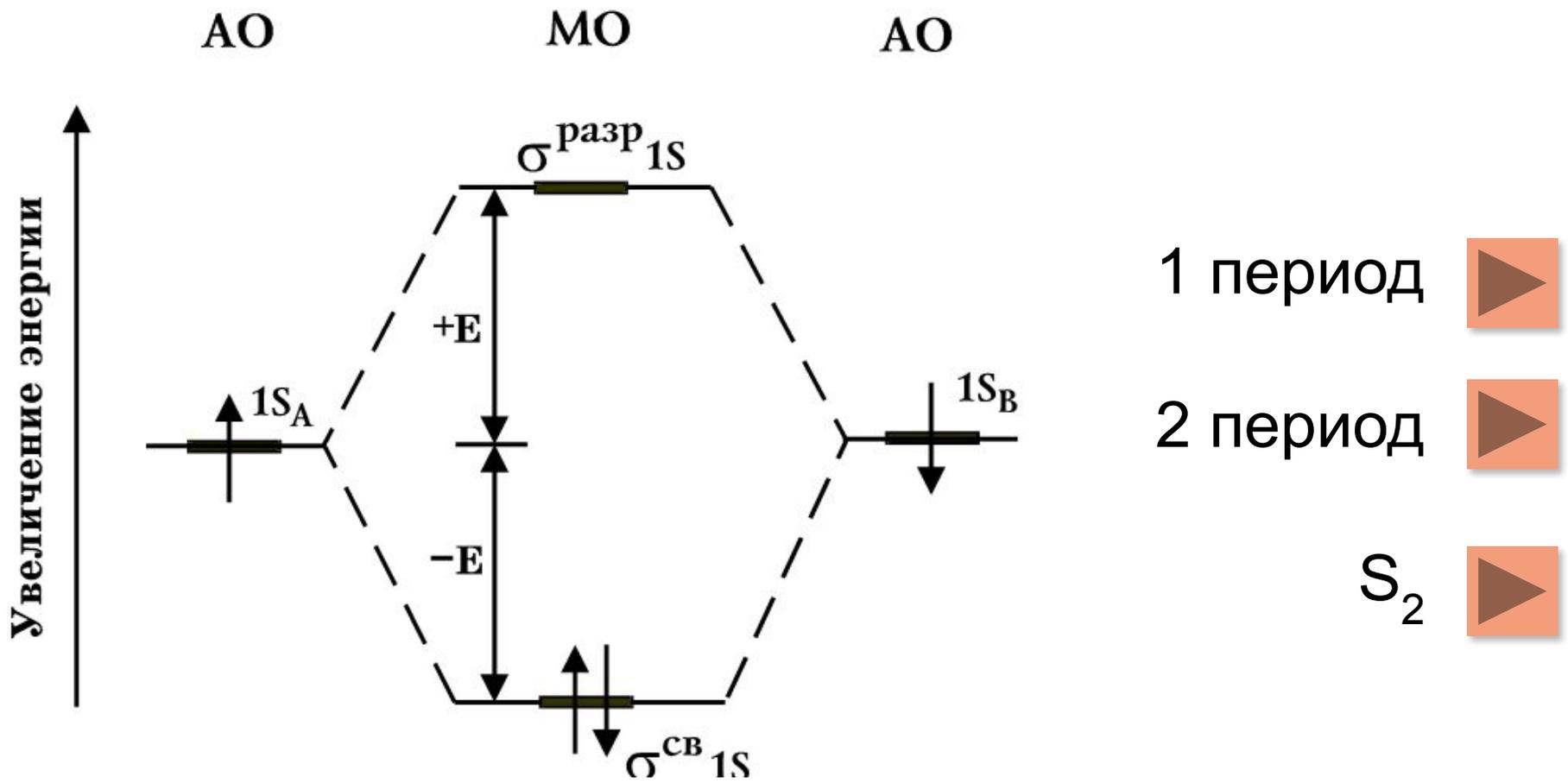
1. Как и в атоме, в молекуле e занимают соответствующие орбитали.

При этом продолжают действовать:

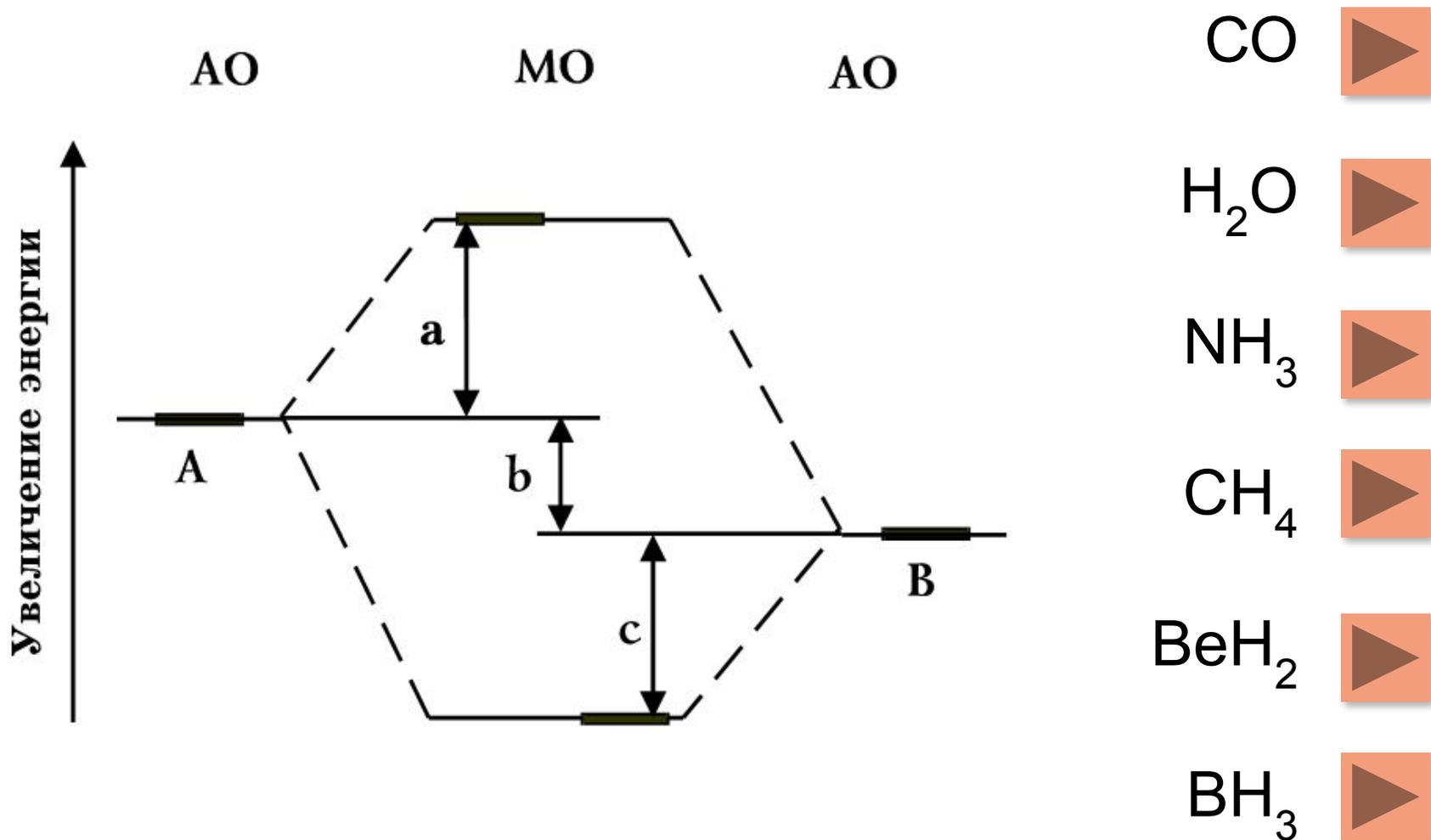
- принцип $\min E$,
- принцип Паули,
- правило Хунда

2. Число МО = суммарному числу АО

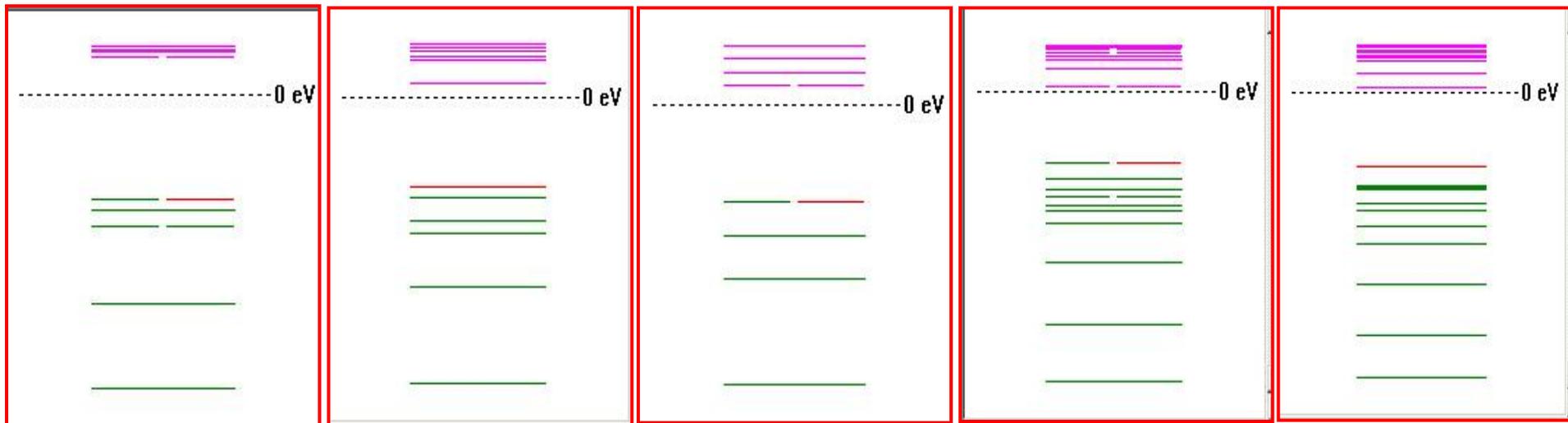
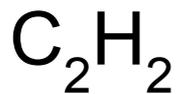
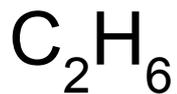
Гомоядерная молекула (H_2)



Гетероядерная молекула

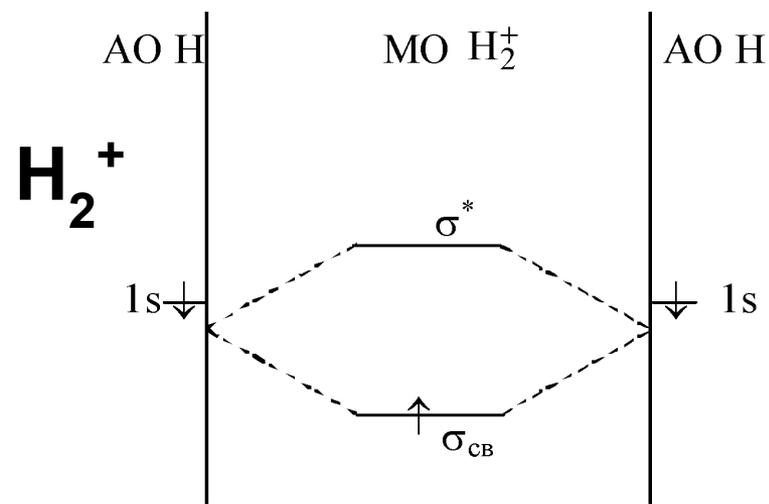
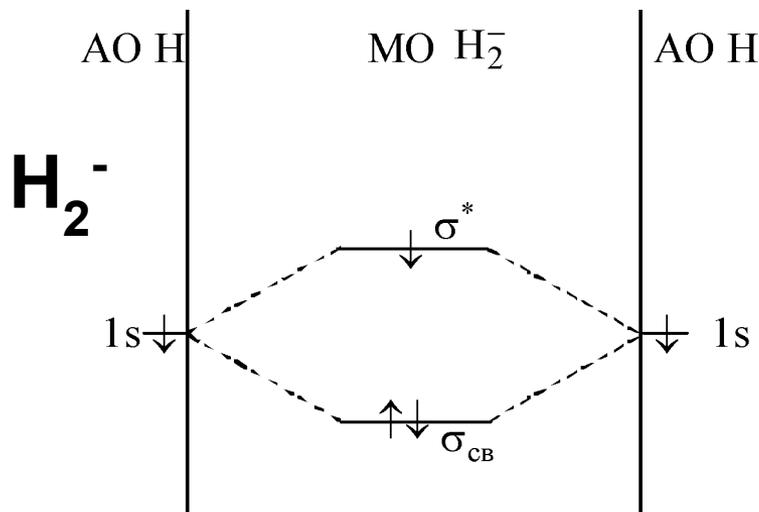
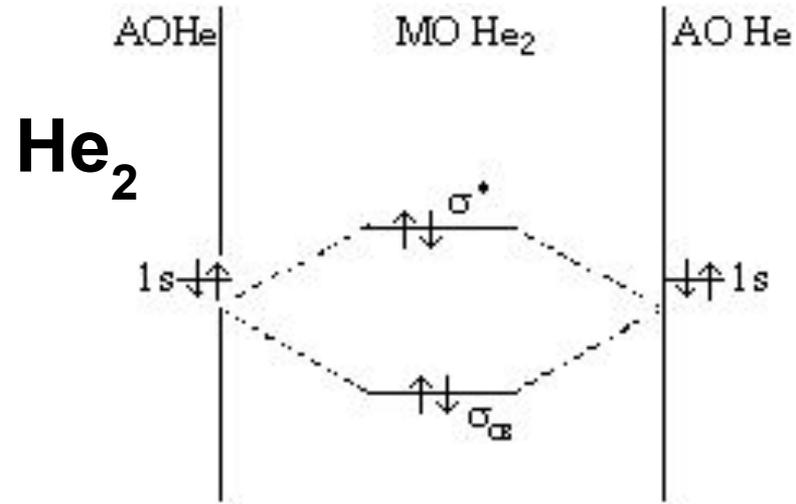
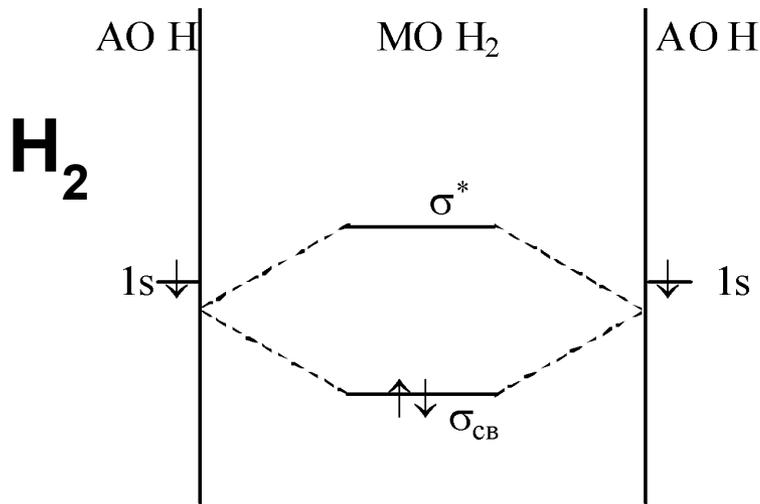


Молекулы не с одним центральным атомом





Двухатомные гомоядерные молекулы 1 периода



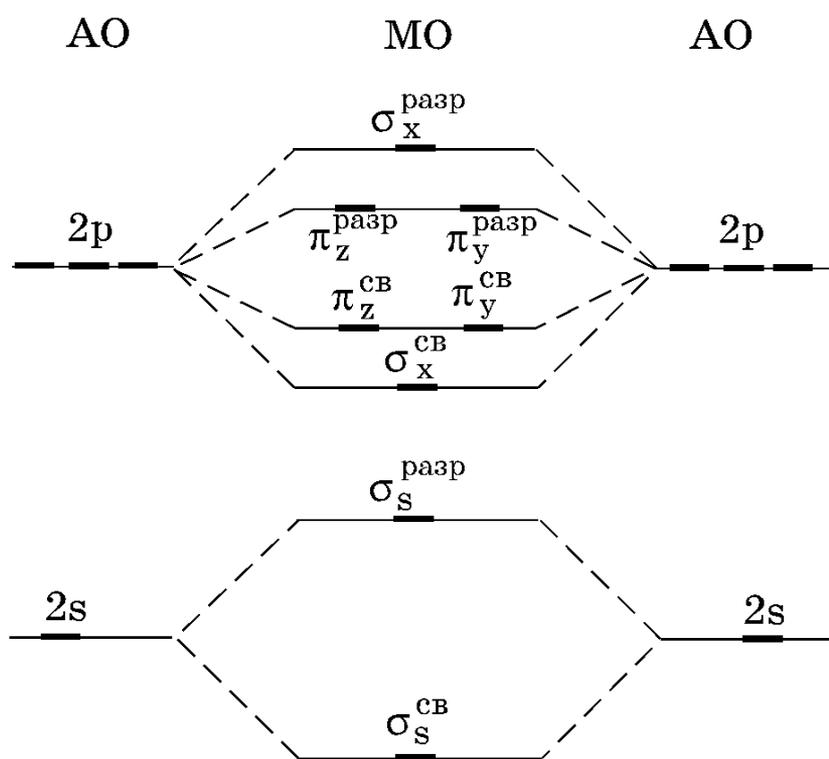
Двухатомные гомоядерные молекулы 2 периода



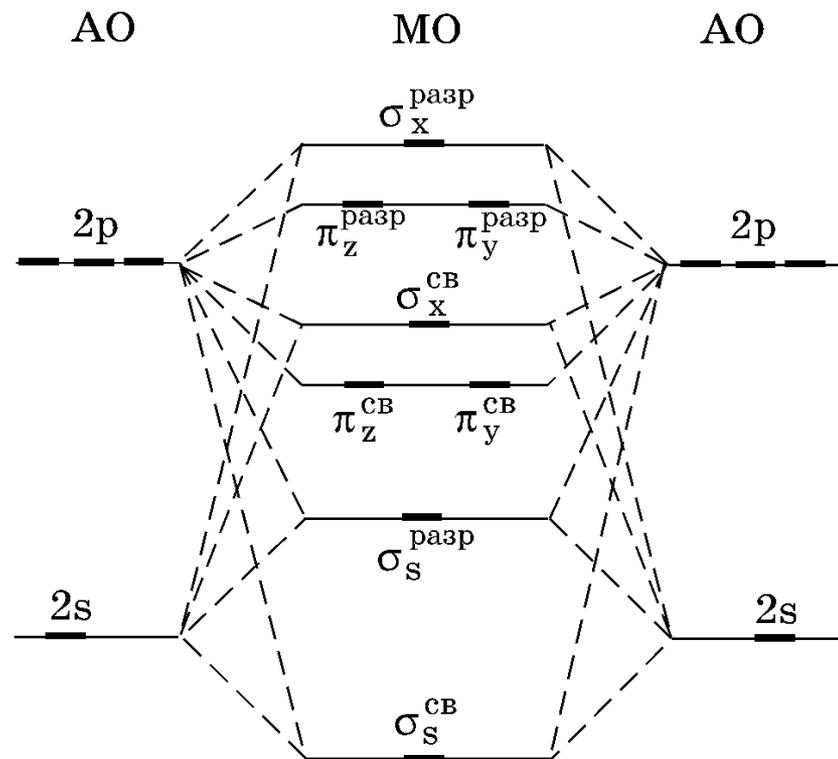
Конец периода
($O_2 - F_2$)

Начало периода
($Li_2 - N_2$)

Увеличение энергии

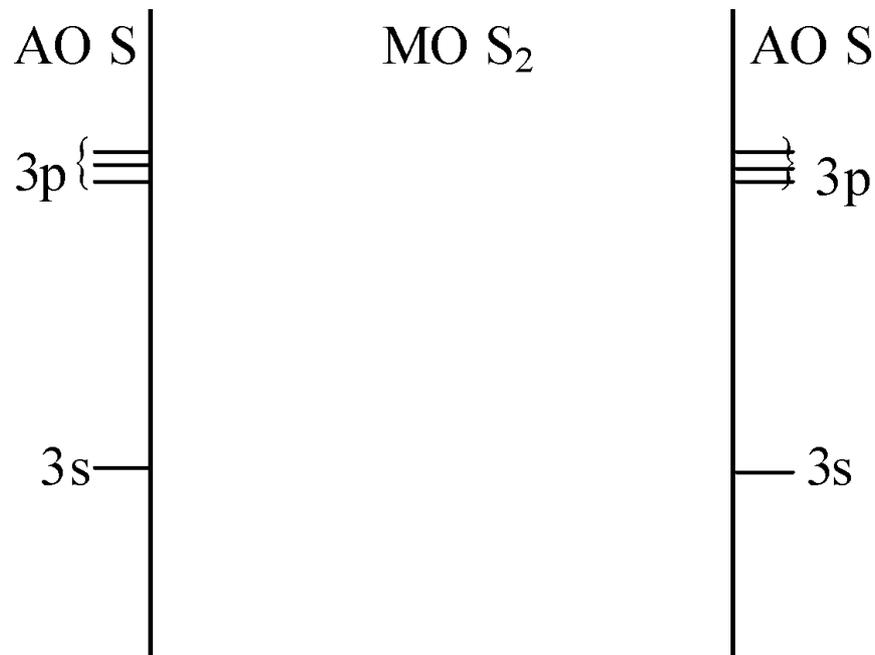


а



Строим энергетическую диаграмму молекулы S_2

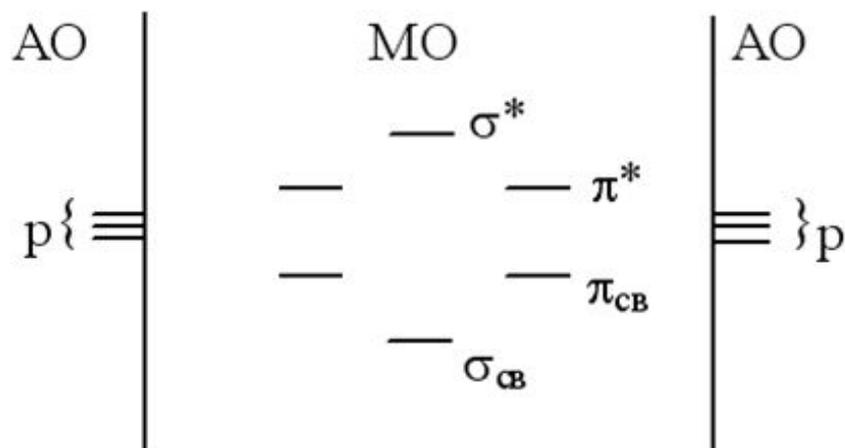
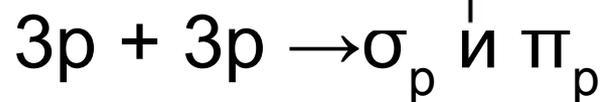
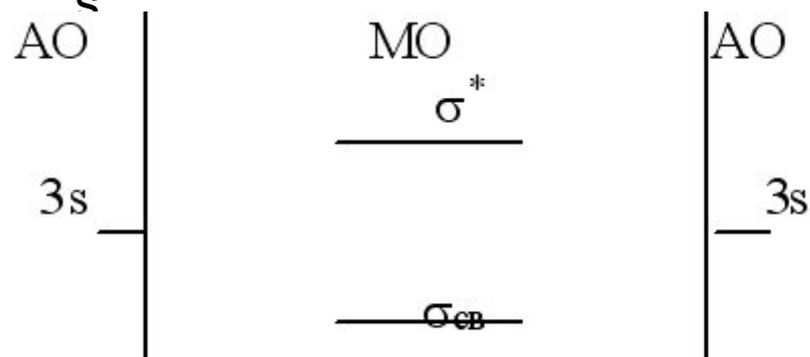
- 1. Строим АО внешнего уровня



- 2. Определяем число МО: $\Sigma \text{ АО} = \Sigma \text{ МО}$
 $4\text{АО S} + 4\text{АО S} = 8\text{МО}$

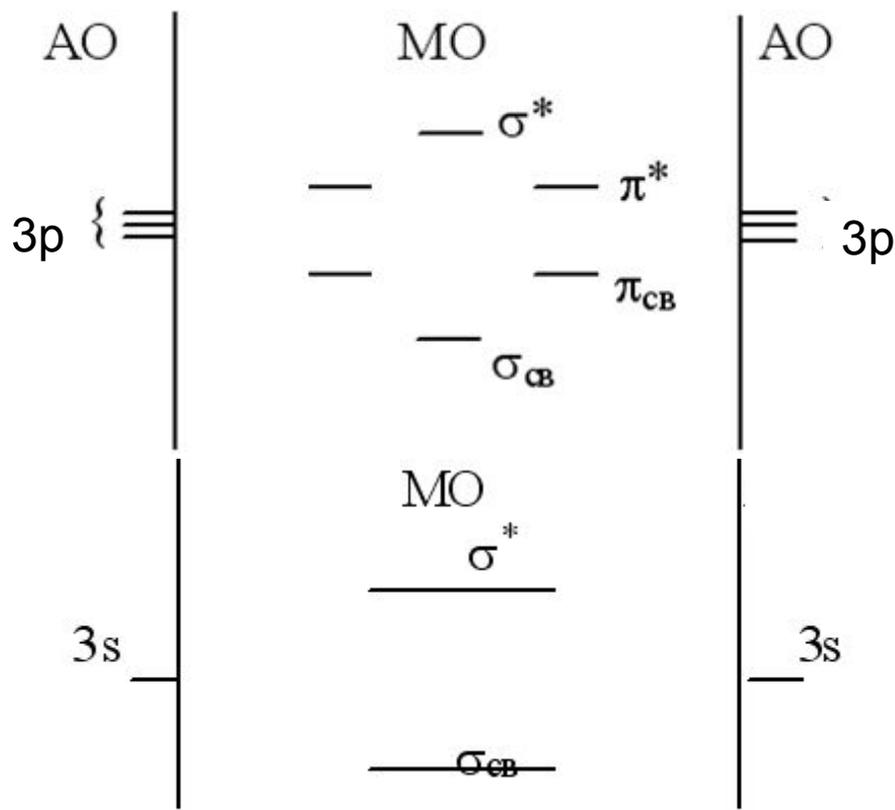
Строим энергетическую диаграмму молекулы S_2

- 3. Определяем тип перекрывания АО



Строим энергетическую диаграмму молекулы S_2

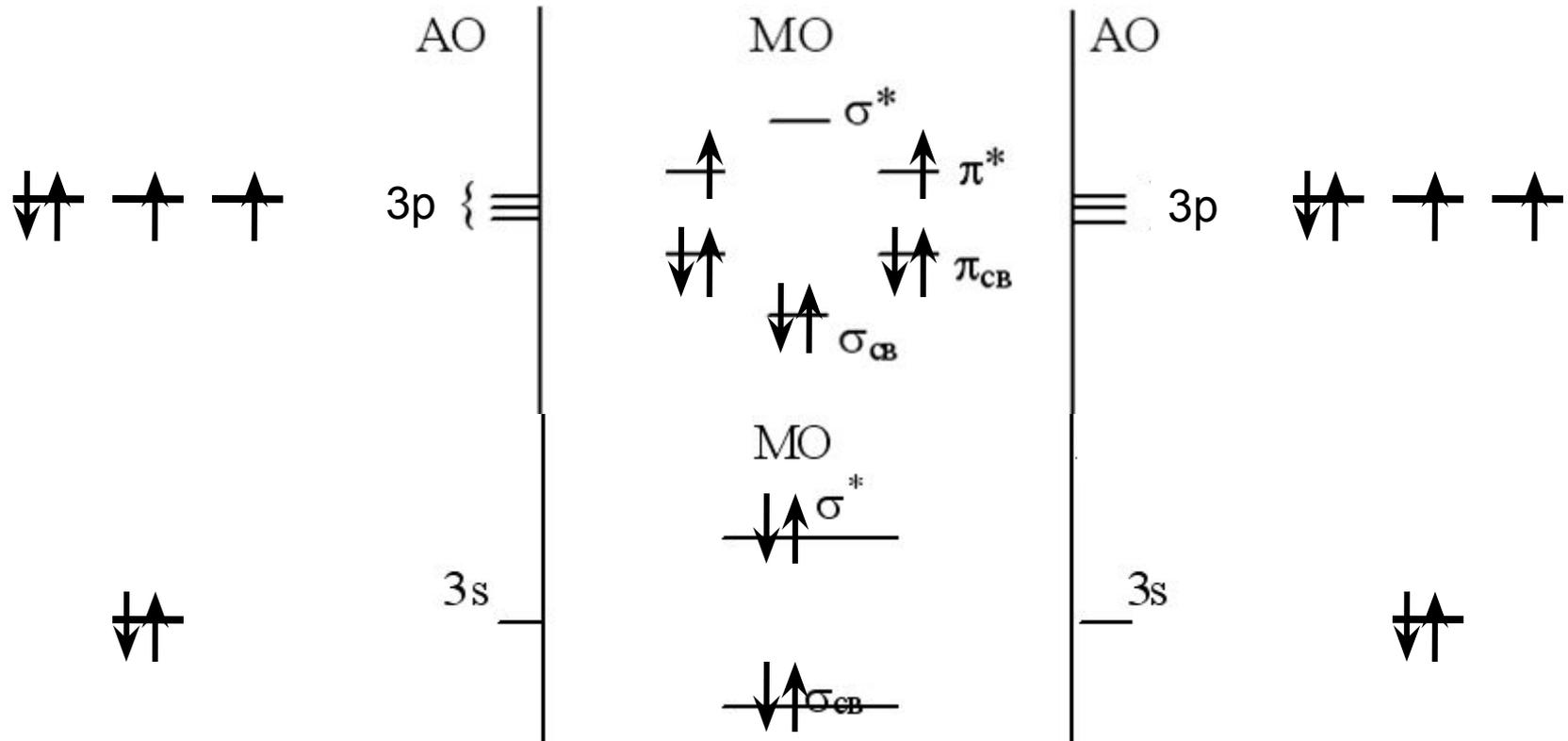
- 4. Общий вид МО



Строим энергетическую диаграмму молекулы S_2



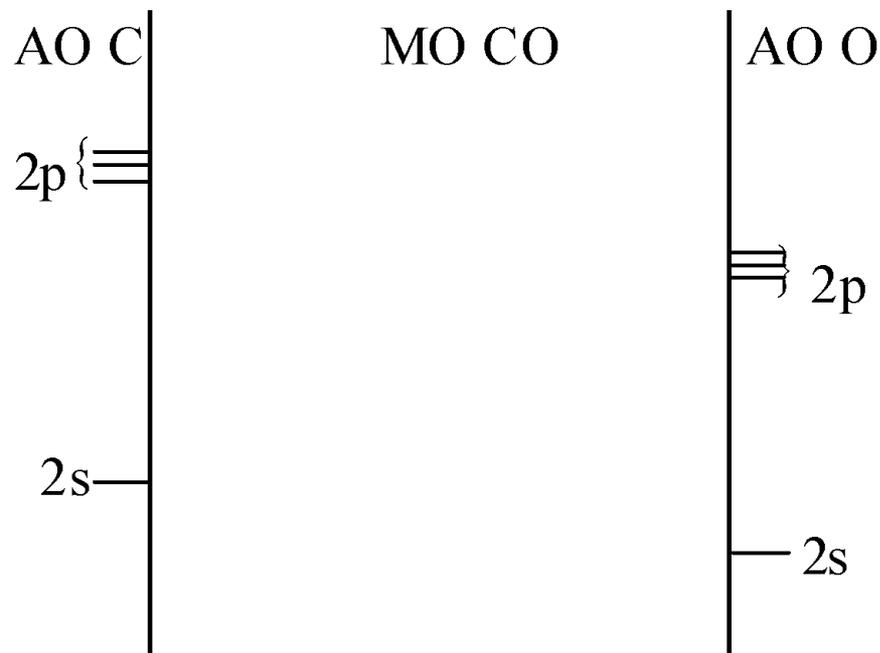
- 5. Заполняем орбитали электронами



- Кратность связи? Магнитные свойства?

Строим энергетическую диаграмму молекулы CO

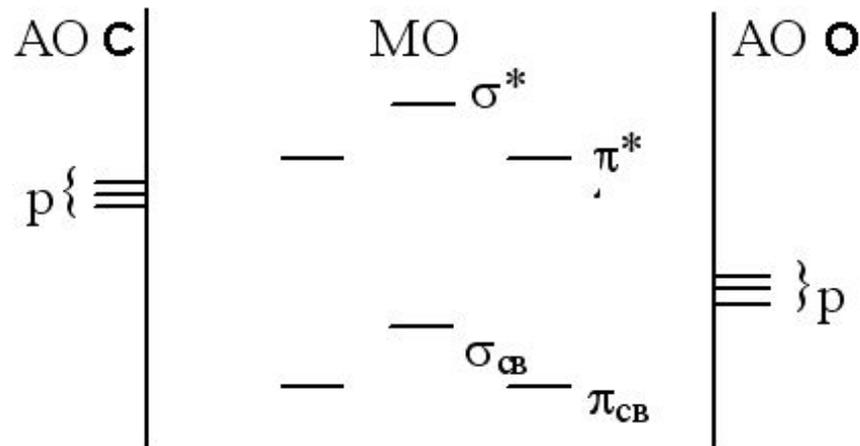
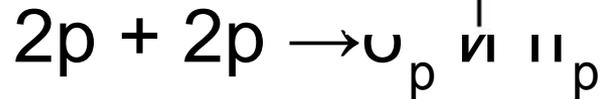
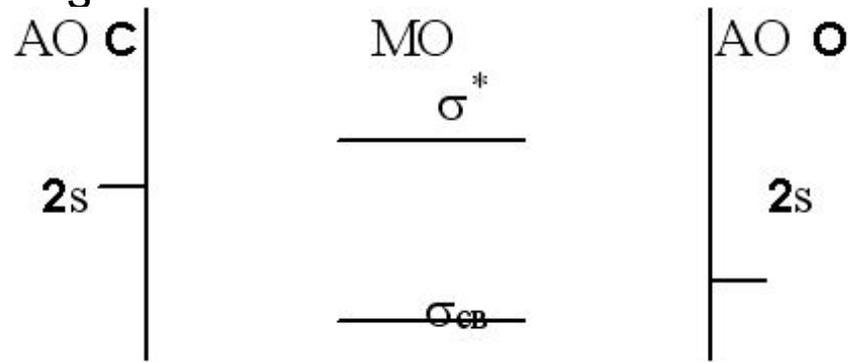
- 1. Строим АО внешнего уровня



- 2. Определяем число МО: $\Sigma \text{AO} = \Sigma \text{MO}$
 $4\text{AO C} + 4\text{AO O} = 8\text{MO}$

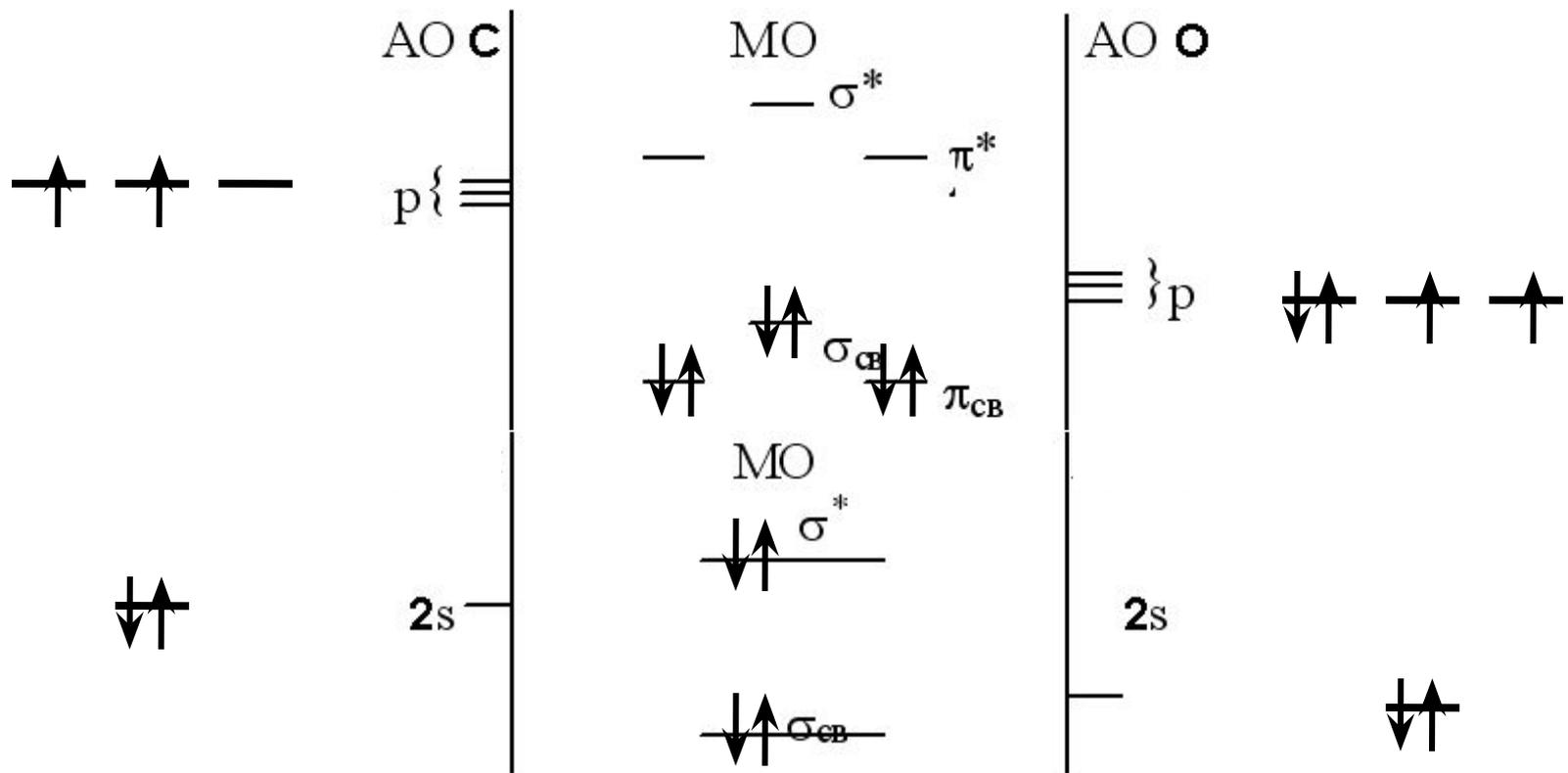
Строим энергетическую диаграмму молекулы CO

- 3. Определяем тип перекрывания АО

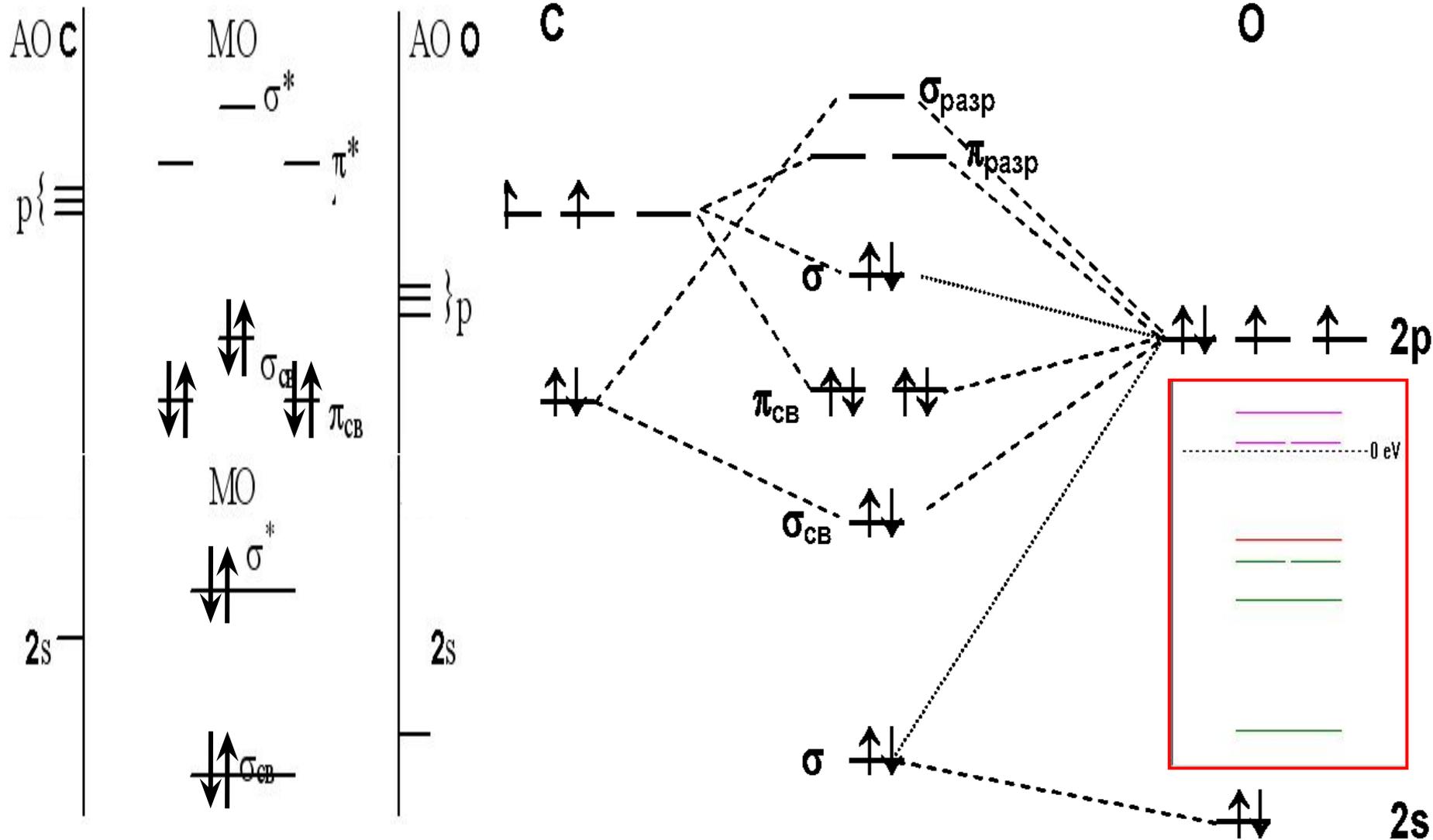


Строим энергетическую диаграмму молекулы CO

- Заполняем орбитали электронами

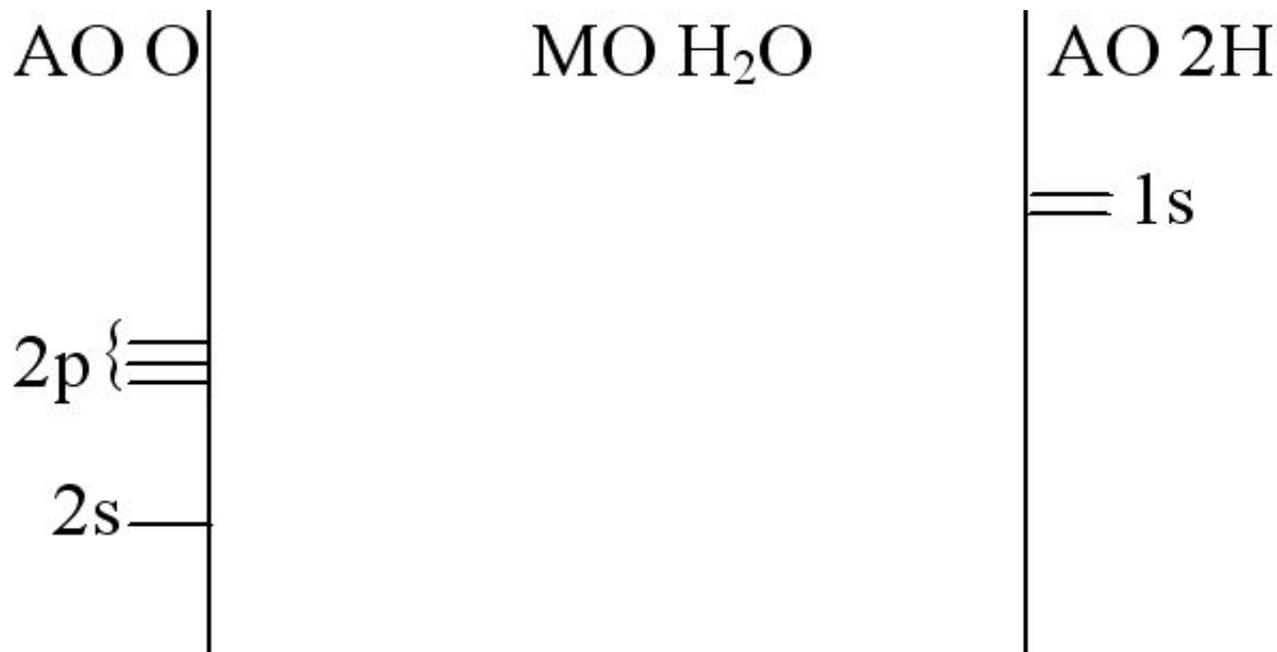


CO (сравнение со строгой диаграммой)



Строим энергетическую диаграмму молекулы H_2O

- 1. Строим АО внешнего уровня



- 2. Определяем число МО: $\Sigma \text{АО} = \Sigma \text{МО}$
 $4\text{АО O} + 2\text{АО H} = 6\text{МО}$

Строим энергетическую диаграмму молекулы H_2O

- 3. Определяем тип перекрывания АО

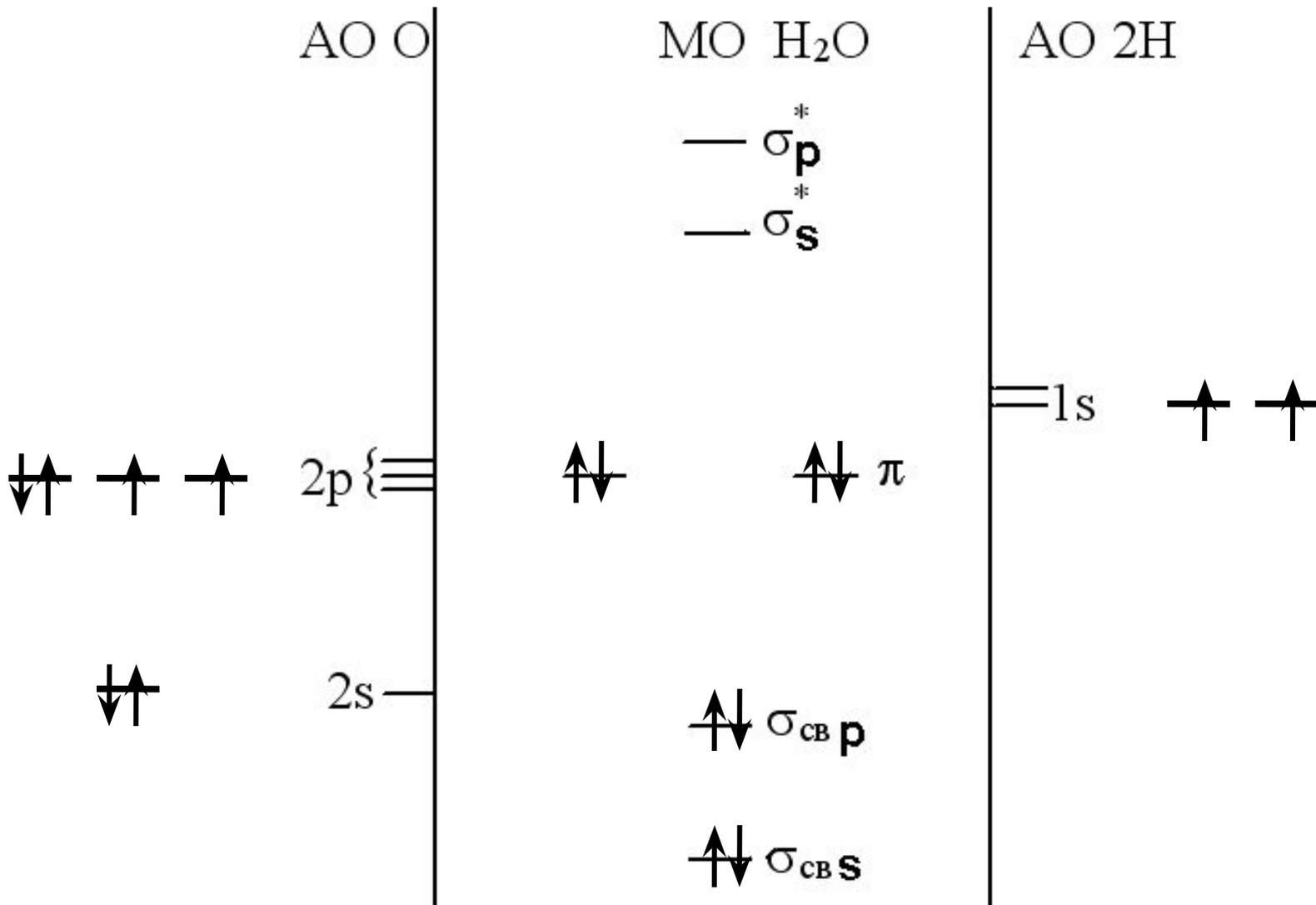


- 4. Определяем число связывающих, разрыхляющих, несвязывающих МО

$$\begin{aligned} \Sigma \text{МО}_{\text{связывающих}} &= \Sigma \text{МО}_{\text{разрыхляющих}} = \Sigma \text{АО}_{\text{min}} = \\ &= 2 * 1 \text{ АО H} = 2 \end{aligned}$$

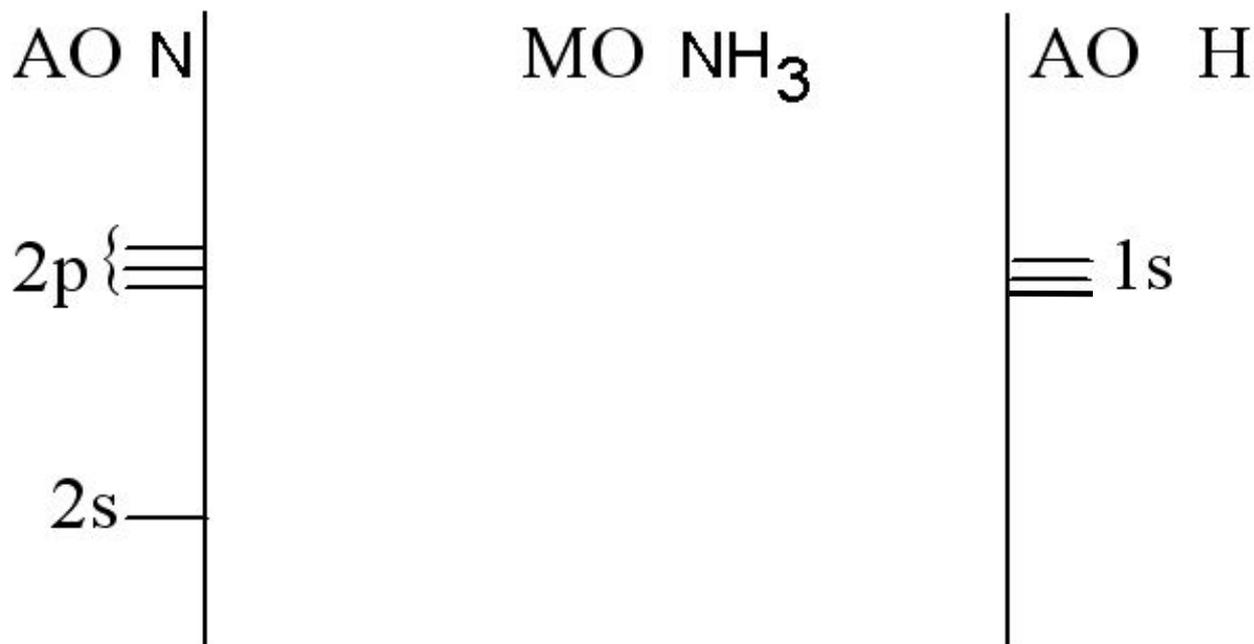
$$\begin{aligned} \Sigma \text{МО}_{\text{несвязывающих}} &= \Sigma \text{МО} - \Sigma \text{МО}_{\text{связывающих}} - \\ &- \Sigma \text{МО}_{\text{разрыхляющих}} = 6 - 2 - 2 = 2 \end{aligned}$$

Строим энергетическую диаграмму молекулы H_2O



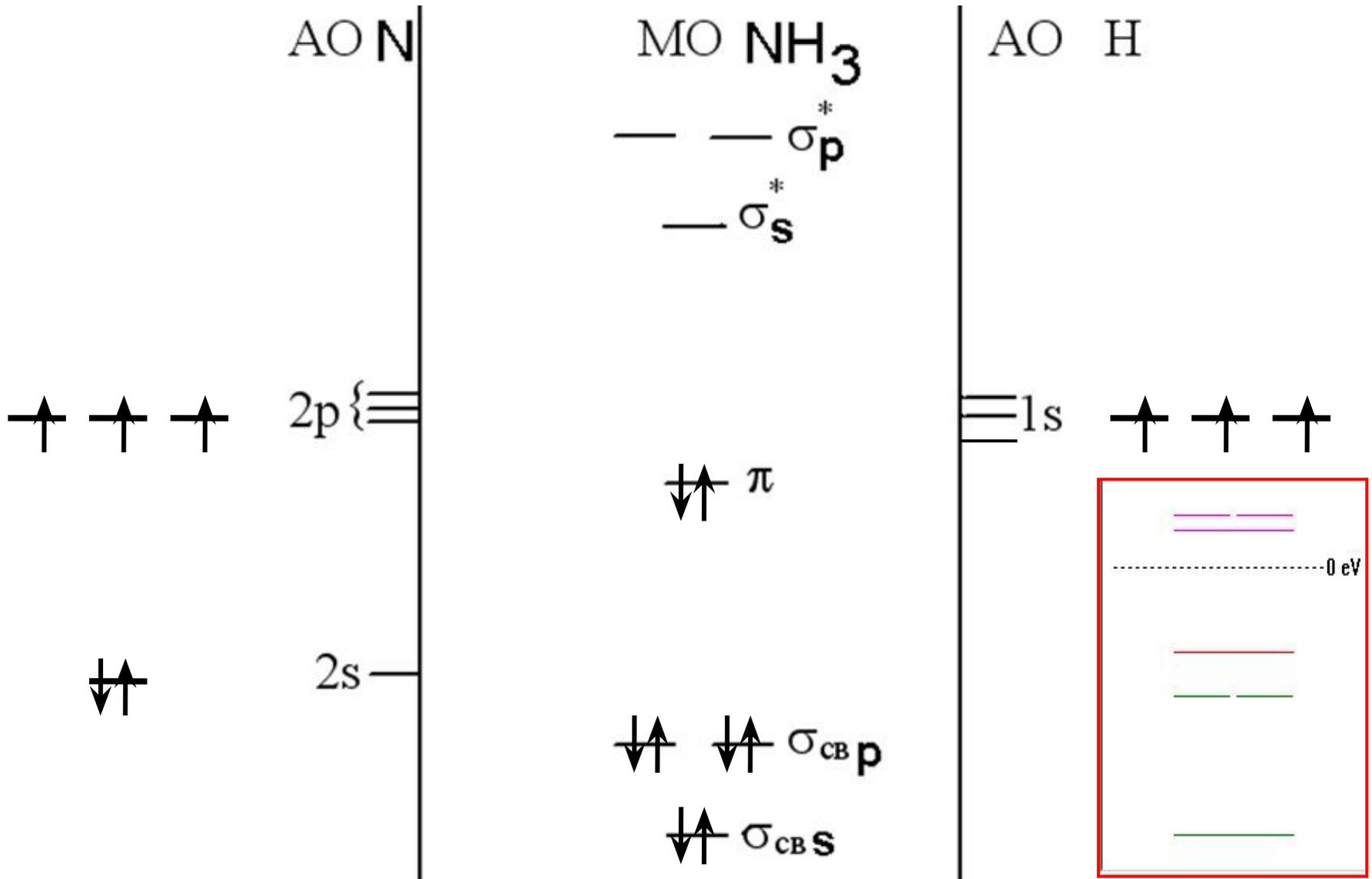
NH₃

- $\Sigma \text{ MO} = 4 \text{ AO N} + 3 \text{ AO H} = 7$
- $\Sigma \text{ MO}_{\text{связ}} = \Sigma \text{ MO}_{\text{разр}} = 3 * 1 \text{ AO H} = 3$
- $\Sigma \text{ MO}_{\text{несв}} = 7 - 3 - 3 = 1$
- $2s + 1s \rightarrow \sigma_s, 2p + 1s \rightarrow \sigma_p$



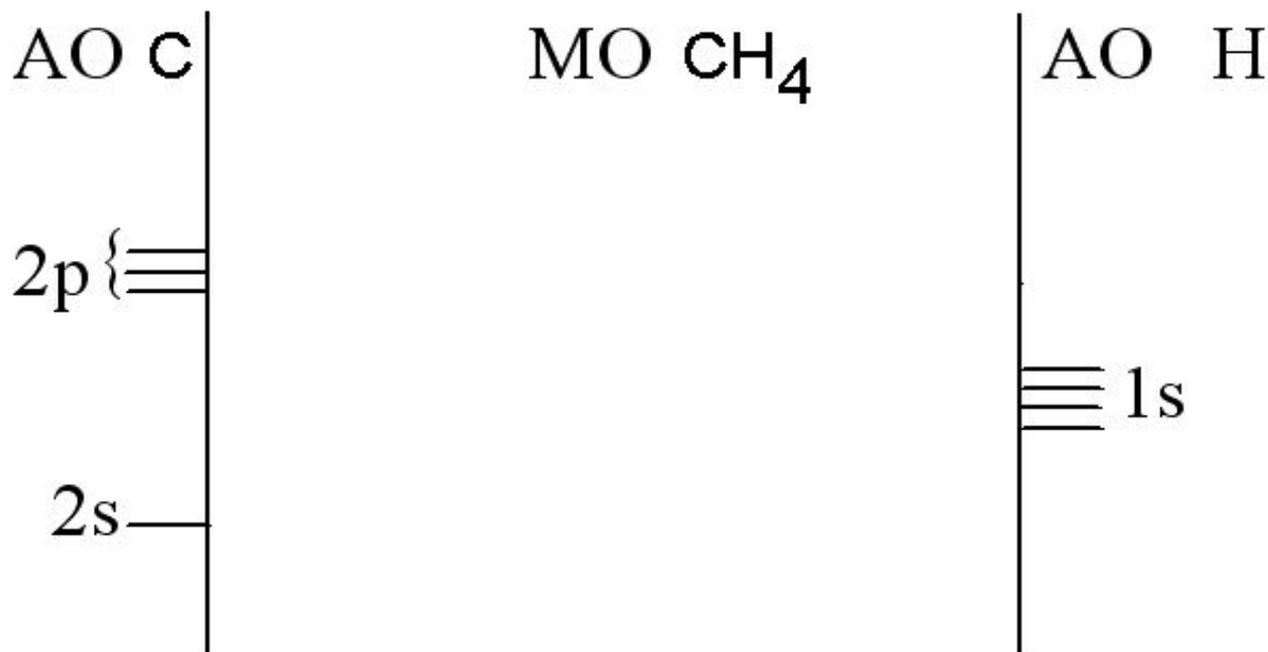


NH₃



CH₄

- $\Sigma \text{ MO} = 4 \text{ AO C} + 4 \text{ AO H} = 8$
- $\Sigma \text{ MO}_{\text{связ}} = \Sigma \text{ MO}_{\text{разр}} = 4 * 1 \text{ AO H} = 4$
- $\Sigma \text{ MO}_{\text{нecв}} = 8 - 4 - 4 = 0$
- $2s + 1s \rightarrow \sigma_s, 2p + 1s \rightarrow \sigma_p$





CH₄

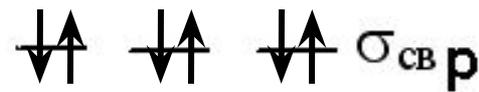
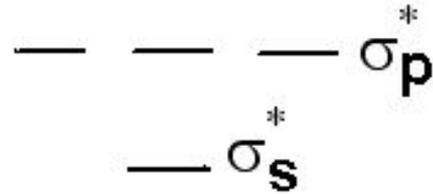
AO C

2p {

2s

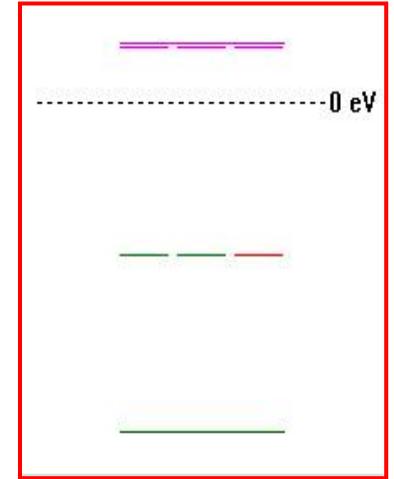


MO CH₄



AO H

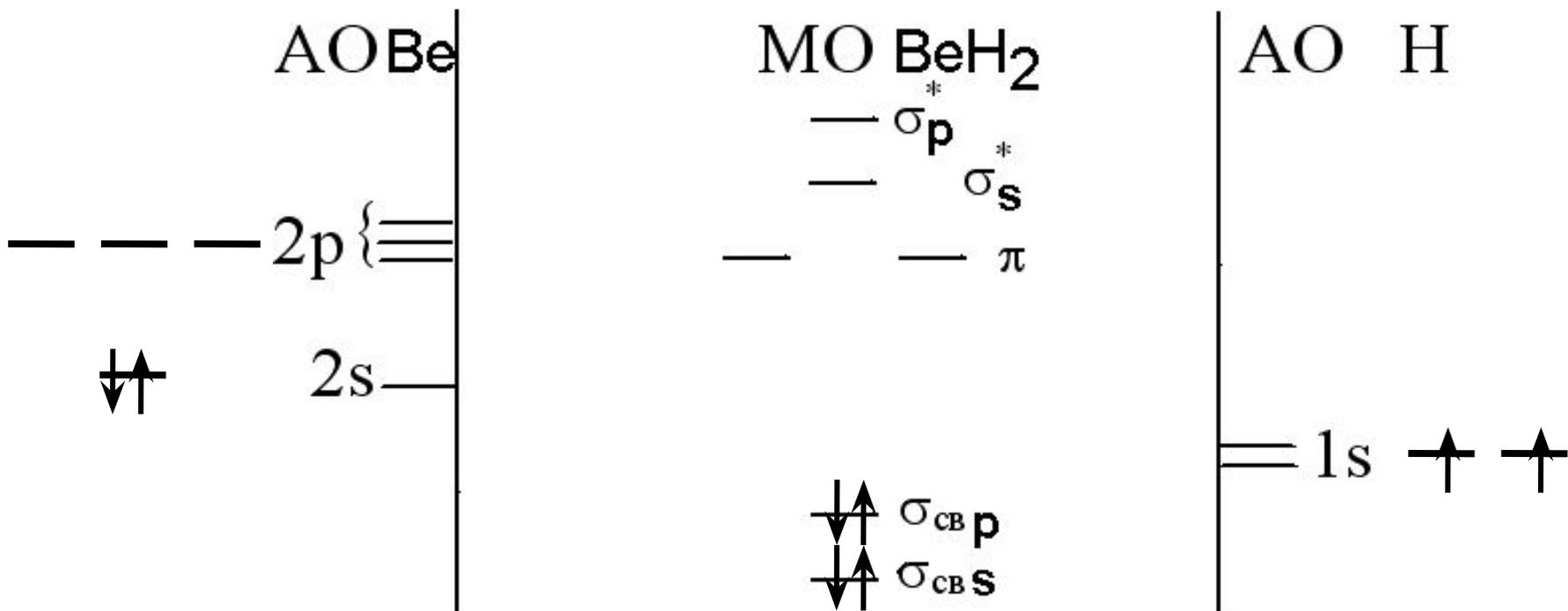
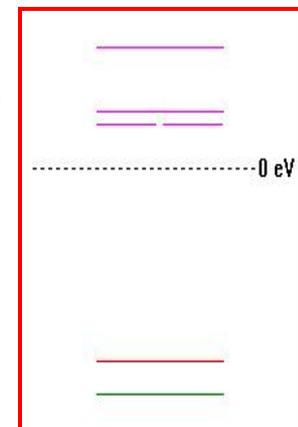
1s



BeH₂



- $\Sigma \text{ MO} = 4 \text{ AO Be} + 2 \text{ AO H} = 6$
- $\Sigma \text{ MO}_{\text{связ}} = \Sigma \text{ MO}_{\text{разр}} = 2 * 1 \text{ AO H} = 2$
- $\Sigma \text{ MO}_{\text{несв}} = 6 - 2 - 2 = 2$
- $2s + 1s \rightarrow \sigma_s$, $2p + 1s \rightarrow \sigma_p$



BH₃



- $\Sigma \text{ MO} = 4 \text{ AO B} + 3 \text{ AO H} = 7$
- $\Sigma \text{ MO}_{\text{связ}} = \Sigma \text{ MO}_{\text{разр}} = 3 * 1 \text{ AO H} = 3$
- $\Sigma \text{ MO}_{\text{несв}} = 7 - 3 - 3 = 1$
- $2s + 1s \rightarrow \sigma_s$, $2p + 1s \rightarrow \sigma_p$

