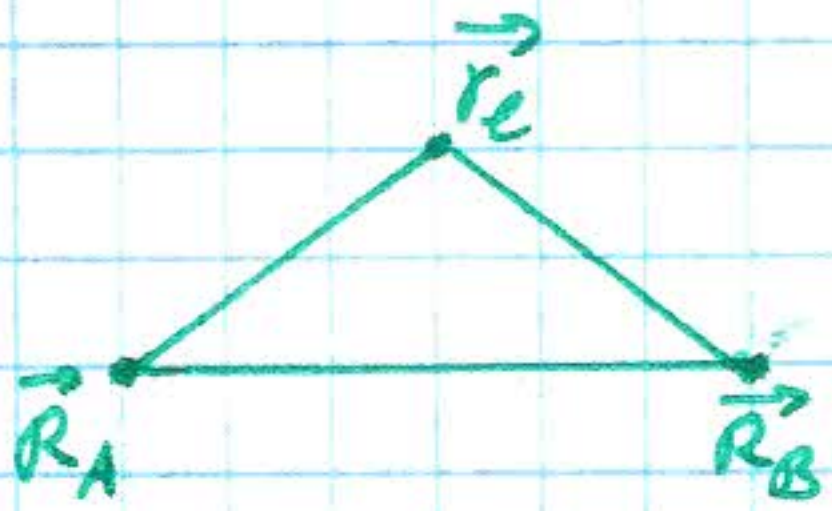


מולקולות H₂⁺ - אטומיות

מולקולות H₂⁺



נניח את ההמילטוניאן האטומי:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_e^2 - \frac{e^2}{|\vec{r}_e - \vec{R}_A|} - \frac{e^2}{|\vec{r}_e - \vec{R}_B|} + \frac{e^2}{|\vec{R}_A - \vec{R}_B|}$$

כפי שאמר, אנו מניחים את משוואת שרינגר האטומית המדויקת, והואפן אטומי זהיר
היה זו. עליך ציפה למצוא ציבוק לקרה את התמונה. לשם כך נשתמש במודל המולקולרי
והנני לנישור את פונקציית העל האטומית המולקולרית כתיבור של פונקציות
של אטומיות. בהנחה שאנו מאור מדויק, ישל הפתרון אקו הוא ינה פתרון מקרה שוטל
התורה אולטראונית כימות רבה זהיר מאור הקשר הכימי.

לשאל האיות כיוצו תתעמל פול העל המולקולרית של לשל היוסוד השני עבולות
האיות נרבות העבולת הו $R_{AB} \rightarrow \infty$. העבולת של האטומים והיה של אנו השני
האטומים A או B הורה $1s_A$ או $1s_B$, ההתבולת. לכן נבחר פונקציה מקורבת
שתשם אנו כפונקציה אטומית (או סדר (ס) התבולת ההפוכות) אשר מקימות
את ההתבולת הנדרשת העבולת R_{AB} . פול זו תפיה מעבולת מפול $1s$ המוכרעת
על המרכיב האטומי והאפשר האטומי, לטעון לשלם את המולקולרית אולו העבולת של פתרון

כעבורה R_{AB}
השני המולקולרית
ש $1s_A$ ו $1s_B$
אולי $1s_A = 1s_B$
לכן ההתבולת
המולקולרית
הפול עדין מהאיות
 $1s_A = 1s_B$
והפתרון המולקולרית
היה סופרפוזיציה
של $1s_A$ ו $1s_B$
שק אנו השני השני
התבולת.

התקשר:

$$\Psi = C_A 1s_A + C_B 1s_B$$

כיוסני פול העל המולקולרית כפנס האטומי של פתרון
המולקולרית.

פונקציה שנתת באוק של נקראת:

התבולת
התבולת
התבולת האטומי
התבולת האטומי
התבולת האטומי
התבולת האטומי

Linear Combination of Atomic Orbitals - Molecular Orbitals (LCAO-MO)

$1s_A, 1s_B$ הוין אורביטלים אטומיים קומבינציה לינארית של פול

התבולת
התבולת האטומי
התבולת האטומי

התורה מאור מקרה זהיר האטומי אולו המולקולרית שנתת (הקורה) את

פונקציה העל האטומית המולקולרית המרכיב $1s$.

המרכיבים כמובן והוין תלויים פרמטרים ה- R_{AB} . המרכיב זו מתן לקבוע

כיווק קשר
אולו העבולת:
התבולת האטומי
התבולת האטומי
התבולת האטומי
התבולת האטומי

את המרכיבים משוקלים סומטורים. כיוון שהמרכיב סומטורים ההסתברות

אמפיתיות האטומית האטומית $1s_A$ ציכרם להיות כשההסתברות למצוא

התבולת האטומי
התבולת האטומי
התבולת האטומי
התבולת האטומי

האטומית האטומית האטומית $1s_B$. כיוון שההסתברות פרופורציונלית למכרם

התורה העבולת האטומית האטומית $1s_B$ וכך אנו נותנו כי

המרכיבים משוקלים נקבלו כי: $C_A = \pm C_B$

משוואה מספרת עבור התנאים נתנם מתק תנאי הנורמל:

$$1 = \langle \Psi | \Psi \rangle = \langle c_A \psi_A + c_B \psi_B | c_A \psi_A + c_B \psi_B \rangle =$$

S_{AB} :

$$= c_A^2 \langle \psi_A | \psi_A \rangle + c_A c_B \langle \psi_A | \psi_B \rangle + c_B c_A \langle \psi_B | \psi_A \rangle + c_B^2 \langle \psi_B | \psi_B \rangle =$$



האלקטרונים שני
הבני התאונת סטורציה
בזכות ולא פונקציות
מכילה ה-2
האלקטרוני הקוונט
התנאים הנורמל:

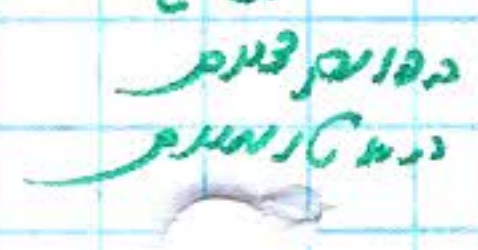
$$= c_A^2 + 2c_A c_B S_{AB} + c_B^2 \stackrel{!}{=} 1$$

נציב במשוואה זו את המשוואה $c_A = \pm c_B$ ונקבל:

$$c_A = c_B: 2c_A^2 + 2c_A^2 S_{AB} = 1 \Rightarrow c_A^2 (2 + 2S_{AB}) = 1 \Rightarrow c_A = c_B = \frac{1}{\sqrt{2(1 + S_{AB})}}$$



$$c_A = -c_B: 2c_A^2 - 2c_A^2 S_{AB} = 1 \Rightarrow c_A^2 (2 - 2S_{AB}) = 1 \Rightarrow c_A = -c_B = \frac{1}{\sqrt{2(1 - S_{AB})}}$$



$$\Psi_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2(1 \pm S_{AB})}} (\psi_A \pm \psi_B)$$

כאן נעשה:

הימין הממוצע
סביב אותו
המרכז המרכזי

המדידות סבוכות יותר או ניתן האופן פשוט להסתמך בסיקורלי סטנדרטית מסוג

צב בכפוי לקבוצ את התנאים של כן יחיד למשל צדק כללי ומצבאות

תנאים הפתוח, לשם כך נשתמש בתנאי הנורמלציה.

אם נתמסל- Ψ כפוי נורמלציה ולתנאים c_A ו- c_B כמסמכי ונורמלציה ונראה

כי מתמלציה של האנרגיה תהיה את אותו הכפוי שספקל מסיקורלי סטנדרטית

עבור התנאים.

כדי לקרן ניתן לבחור גם את האקספוננט (γ) של האנרגיה של האנרגיה ψ_A ו- ψ_B

כמסמכי ונורמלציה לפי העל ולשבר הבק את הקורב אוק אנו מעדוסים של

לצטרף את שם הנורמלציה של התנאים c_A, c_B היום לנורמלציה והמספר הצדק

משוואת שדורג באמצעות שוואת הנורמלציה ממנה לבחור של אנרגיה הלינארית

הכונים לכסון מסיקורלי - פדורבא אפר התמסר ונצד לבצד היסא. או הייט מעדוסים

לשם נורמלציה של המלצן המרכזי תפגון הנורמלציה לו היה לינאר ונראה היה תופק

למאז סבוק הצדק עבר מלקורל צדקות המעבדת אנרגיה של אטומים רבים

אשר לשם אנו צדק עם נכנס לבצד נורמלציה של מלצד המרכזי האטומי. עסק צדק

לבחוק בומוציה הלינארית של התנאים ולתוסף צדק פונקציות אטומיות בכפוי

לינארית את פונקציות הנורמלציה מאשר לבצד נורמלציה לו היה לינארית של האקספוננט

(המלצד המרכזי האטומים האקספוננט).

מצביות המקצמים האמצעיים עקרון הוויטלובה:

ביטוי האנרגיה הוויטלובה היא:

$$E = \frac{\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = \frac{\langle c_A \psi_A + c_B \psi_B | \hat{H} | c_A \psi_A + c_B \psi_B \rangle}{\langle c_A \psi_A + c_B \psi_B | c_A \psi_A + c_B \psi_B \rangle} =$$

$$= \frac{|c_A|^2 \langle \psi_A | \hat{H} | \psi_A \rangle + c_A^* c_B \langle \psi_A | \hat{H} | \psi_B \rangle + c_B^* c_A \langle \psi_B | \hat{H} | \psi_A \rangle + |c_B|^2 \langle \psi_B | \hat{H} | \psi_B \rangle}{|c_A|^2 \langle \psi_A | \psi_A \rangle + c_A^* c_B \langle \psi_A | \psi_B \rangle + c_B^* c_A \langle \psi_B | \psi_A \rangle + |c_B|^2 \langle \psi_B | \psi_B \rangle}$$

אנרגיות
אנרגיות
כי המקצמים
c_B - c_A
ממנים

למשל:

$$\left\{ \begin{aligned} H_{AA} &= \langle \psi_A | \hat{H} | \psi_A \rangle \\ H_{BB} &= \langle \psi_B | \hat{H} | \psi_B \rangle = H_{AA} \\ H_{AB} &= \langle \psi_A | \hat{H} | \psi_B \rangle \\ H_{BA} &= \langle \psi_B | \hat{H} | \psi_A \rangle = H_{AB}^* = H_{AB} \end{aligned} \right.$$

אנרגיות הוויטלובה:

$$\left\{ \begin{aligned} S_{AA} &= \langle \psi_A | \psi_A \rangle = 1 \\ S_{BB} &= \langle \psi_B | \psi_B \rangle = 1 \\ S_{AB} &= \langle \psi_A | \psi_B \rangle = S \\ S_{BA} &= S_{AB}^* = S_{AB} = S \end{aligned} \right.$$

אנרגיות התפיסה:

אנרגיות התפיסה S_AB מתאפס עבור הכתמים הוויטלובה הפזורים במרחב S -> 0
 ובאשר הוויטלובה נמצאים בקוץ באותו המקום הוא הוויטלובה S -> 1
 בין הוויטלובה קצרים הוא התפיסה 0 <= S <= 1
 האמצעיות הוויטלובה אלו נכנס כעת לשיעור:

$$E = \frac{c_A^2 H_{AA} + 2c_A c_B H_{AB} + c_B^2 H_{BB}}{c_A^2 + 2c_A c_B S + c_B^2}$$

מקצמים
ממנים

~~בפנימצביות אטומית הוויטלובה ואת המקצמים c_A ו-c_B הם למשל אטומים זהים E
 כיוון שיש מרחק בין-אטומי נתון H_AB, H_AA הם קבועים, ולכן אנו רואים
 לפי c_A ו-c_B אנו יכולים למצוא את c_B - c_A שיש בו הוויטלובה שיש להם את
 E.~~

במרחק בין אטומי מתן H_{AB}, H_{AA}, H_{BB} ו- S הינם קבועים. עם כן פיתוחי הנורמליזציה יהיו c_A ו- c_B מתצמי הפנייה של פני העל המוקדמות בהסנס סטריטוריקולאליס האטומים עם עליה למצוא את c_A ו- c_B אושר ומצדדן את S . כדי לקנות על לעצמית S ולהיות לרפס הכפול למצוא את H_{AB} ואת H_{AA} ו- H_{BB} שמתקיים שמתקיים אותו. הכפול רפס את הפינת עקול יתולת לרפס אתה את המשוואה זכור S . לרפס כן, נכפול אתה הממש הממש והזכור אנפיש:

$$E(c_A^2 + 2c_A c_B S + c_B^2) = c_A^2 H_{AA} + 2c_A c_B H_{AB} + c_B^2 H_{BB}$$

$$\Rightarrow c_A^2 (H_{AA} - E) + 2c_A c_B (H_{AB} - ES) + c_B^2 (H_{BB} - E) = 0$$

כדי למצוא c_A ו- c_B ולשורה את $\frac{\partial E}{\partial c_A} = 0$ ואת $\frac{\partial E}{\partial c_B} = 0$ לרפס. למצוא רפס c_A :

$$2c_A (H_{AA} - E) - c_A^2 \frac{\partial E}{\partial c_A} + 2c_B (H_{AB} - ES) - 2c_A c_B S \frac{\partial E}{\partial c_A} = 0$$

$$\Rightarrow 2c_A (H_{AA} - E) + 2c_B (H_{AB} - ES) = 0$$

האופן צומע למצוא רפס c_B :

$$+2c_A (H_{AB} - ES) - 2c_A c_B S \frac{\partial E}{\partial c_B} + 2c_B (H_{BB} - E) - c_B^2 \frac{\partial E}{\partial c_B} = 0$$

~~$$2c_A (H_{AB} - ES) + 2c_B (H_{BB} - E) = 0$$~~

$$\Rightarrow 2c_A (H_{AB} - ES) + 2c_B (H_{BB} - E) = 0$$

את שתי המשוואות שמתקבלו מתן כעת לרפס הכתבה מטריוניון שקרית עפרה אתה פני העל המוקדמות בהסנס סטריטוריקולאליס האטומים (LCAO-MO) הבקעה היפירטוריקולאליס הופכת לבקעה אלגורית:

$$\begin{pmatrix} \lambda(H_{AA} - E) & \lambda(H_{AB} - ES) \\ \lambda(H_{AB} - ES) & \lambda(H_{BB} - E) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_A \\ c_B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

הצורה: משוואה המשוואה התקולרות

$$(\tilde{H} - E\tilde{S})\vec{c} = \vec{0}$$

הפסון הטרונורלי ומשוואה זו הית $c_A = c_B = 0$. אוקם פסון שם מאפס את פונקציות העל. הכפול יתקבל פסון שיתו טרוונורלי עליהם לבדוק כי הטרונורלי של העל חזים תמוס.

$$\begin{vmatrix} H_{AA} - \epsilon & H_{AB} - \epsilon S \\ H_{AB} - \epsilon S & H_{AA} - \epsilon \end{vmatrix} \stackrel{!}{=} 0 \Rightarrow (H_{AA} - \epsilon)^2 - (H_{AB} - \epsilon S)^2 = 0$$

$$H_{BB} = H_{AA}$$

$$\Rightarrow (H_{AA} - \epsilon) = \pm (H_{AB} - \epsilon S)$$

קבלנו שני פתרונות עבור ϵ :

$$\begin{cases} H_{AA} - \epsilon = H_{AB} - \epsilon S \Rightarrow \epsilon_u = \frac{H_{AA} - H_{AB}}{1 - S} \\ H_{AA} - \epsilon = -H_{AB} + \epsilon S \Rightarrow \epsilon_g = \frac{H_{AA} + H_{AB}}{1 + S} \end{cases}$$

המשוואה המזוהה היא

מצב היסודי

$$H_{AB} < 0$$

ϵ_u ו- ϵ_g הן אנרגיות הממוקדות בקוון-ארזוני ציבורי H_{AA} ו- H_{AB} .

~~אנרגיית הקוון-ארזוני ציבורי היא ϵ_g והיא נמוכה יותר מאנרגיית הקוון-ארזוני יחיד H_{AA} . זה נובע מכך ש- $H_{AB} < 0$ ו- $S > 0$.~~

הכיוון להמוקדות האנרגיה נקבע על ידי סימני H_{AB} ו- S . כיוון ש- $H_{AB} < 0$ ו- $S > 0$, אנרגיית הקוון-ארזוני ציבורי ϵ_g נמוכה יותר מאנרגיית הקוון-ארזוני יחיד H_{AA} .

אנרגיית הקוון-ארזוני ציבורי ϵ_g נמוכה יותר מאנרגיית הקוון-ארזוני יחיד H_{AA} . זה נובע מכך ש- $H_{AB} < 0$ ו- $S > 0$.
 $\Delta G = \Delta H - T \Delta S$
 $= \Delta H$

כיוון שהאנרגיה נמוכה יותר בקוון-ארזוני ציבורי, זהו המצב היציב יותר. אנרגיית הקוון-ארזוני יחיד H_{AA} היא גבוהה יותר.

לפיכך, אנרגיית הקוון-ארזוני ציבורי ϵ_g היא נמוכה יותר מאנרגיית הקוון-ארזוני יחיד H_{AA} . זה נובע מכך ש- $H_{AB} < 0$ ו- $S > 0$.

אנרגיית הקוון-ארזוני ציבורי ϵ_g היא נמוכה יותר מאנרגיית הקוון-ארזוני יחיד H_{AA} . זה נובע מכך ש- $H_{AB} < 0$ ו- $S > 0$.

ההתאמה בין ϵ_g ו- H_{AA} .

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_e^2 - \frac{e^2}{|\vec{r}_e - \vec{R}_A|} - \frac{e^2}{|\vec{r}_e - \vec{R}_B|} + \frac{e^2}{|\vec{R}_A - \vec{R}_B|}$$

ההתאמה בין ϵ_g ו- H_{AA} .

$$H_{AA} = \int \psi_A \hat{H} \psi_A dV = \int \psi_A \left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_e^2 - \frac{e^2}{|\vec{r}_e - \vec{R}_A|} \right] \psi_A dV + \frac{e^2}{|\vec{R}_A - \vec{R}_B|} \int \psi_A^2 dV$$

$$= E_{1s} + J$$

ההתאמה בין ϵ_g ו- H_{AA} .

$$J \equiv \frac{e^2}{|\vec{R}_A - \vec{R}_B|} = \int \psi_A \frac{e^2}{|\vec{r}_e - \vec{R}_B|} \psi_A dV \stackrel{\text{a.u.}}{=} e^{-2R} \left(1 + \frac{1}{R} \right) ; R = R_{AB} = |\vec{R}_A - \vec{R}_B|$$

$\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle = E_{15} \langle 15_B | 15_B \rangle$: HAB כנסות

$$H_{AB} = \int 15_A \hat{H} 15_B dV = \int 15_A \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{e^2}{|\vec{r} - \vec{r}_A|} \right] 15_B dV - \int 15_A \frac{e^2}{|\vec{r} - \vec{r}_A|} 15_B dV + \frac{e^2}{|\vec{r}_A - \vec{r}_B|} \int 15_A 15_B dV =$$

$$= E_{15} \int 15_A 15_B dV + \underbrace{\frac{e^2}{R} S - \int 15_A \frac{e^2}{|\vec{r} - \vec{r}_A|} 15_B dV}_{K''} = E_{15} S + K$$

$$K \equiv \frac{e^2 S}{R} - \int 15_A \frac{e^2}{|\vec{r} - \vec{r}_A|} 15_B dV = \frac{S}{R} - e^{-R} (1+R)$$

ובואו נראה שיש להם ביטויים מסוימים עבור אנרגיה התפוסה:

$$S = e^{-R} \left(1 + R + \frac{R^2}{3} \right)$$

$$H_{AA} = E_{15} + J = E_{15} + e^{-2R} \left(1 + \frac{1}{R} \right)$$

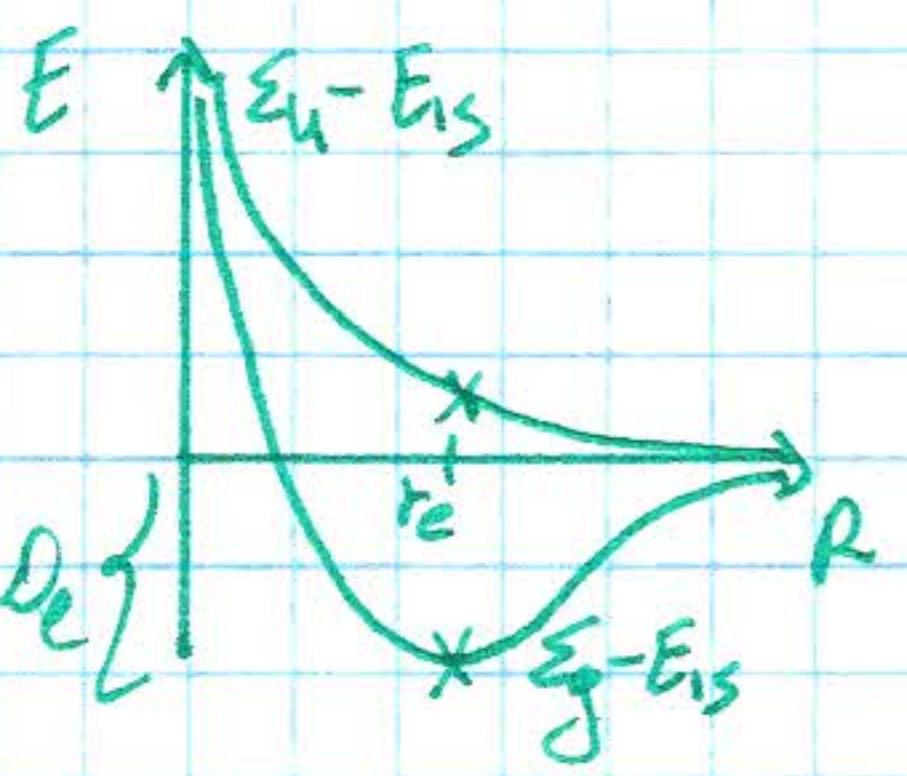
$$H_{AB} = E_{15} S + K = E_{15} e^{-R} \left(1 + R + \frac{R^2}{3} \right) + \frac{e^{-R} \left(1 + R + \frac{R^2}{3} \right)}{R} - e^{-R} (1+R)$$

ובואו נראה E_g ו- E_u נקודות:

$$E_g = \frac{H_{AA} + H_{AB}}{1 + S} = \frac{E_{15} + J + E_{15} S + K}{1 + S} = E_{15} \frac{(1+J)}{(1+S)} + \frac{J+K}{1+S} = E_{15} + \frac{e^{-2R} \left(1 + \frac{1}{R} \right) + \frac{e^{-R} \left(1 + R + \frac{R^2}{3} \right)}{R} - e^{-R} (1+R)}{1 + e^{-R} \left(1 + R + \frac{R^2}{3} \right)}$$

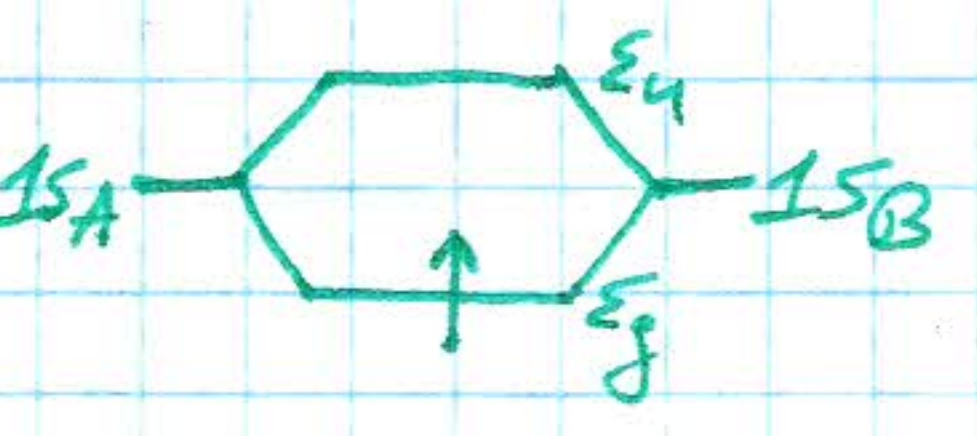
$$E_u = \frac{H_{AA} - H_{AB}}{1 - S} = \frac{E_{15} + J - E_{15} S - K}{1 - S} = E_{15} \frac{(1+J)}{(1-S)} + \frac{J-K}{1-S} = E_{15} + \frac{e^{-2R} \left(1 + \frac{1}{R} \right) - \frac{e^{-R} \left(1 + R + \frac{R^2}{3} \right)}{R} + e^{-R} (1+R)}{1 - e^{-R} \left(1 + R + \frac{R^2}{3} \right)}$$

כעת נראה שצורה של E_g כפונקציה של R. אם היה לנו E_{15} ייחודי קודם



כיוון שאם הם לבדוקים E_{15} אלו ייחודיים קודם כיוון: כפי שרואים בהמשך, הערך המספרים של אנרגיה הקשר והערכת שווה המסקנה אולם התמללה אלוהי עדיין יש אולם התמונה הנוכחית מתקבלת היטב.

באמת, בין לדיון נחמם (לפונקציה של אנרגיה) נבוא לראות את יציבות



הקשר הכוחו צלילן סכומי ע"י קואורנטיות: כן, סידור המבנה הנוכחי של תורת האטום המודרני 15_A ו-15_B. נראה שיש דמיון מוחלט עם המודל הקלאסי.

באשר לתת הרמות המוקדמות התקבלה האנרגיה נמוכה מאלו של הרמה הקודמת.
 הוסיף $R_{AB} - S$ כוונה הייתה הקושי H_{AB} אתה הולך בין המילים.

$$\begin{pmatrix} H_{AA} & H_{AB} \\ H_{BA} & H_{BB} \end{pmatrix}$$

הפיזור בין הרמות מביד מן האנרגיה הלו אלקטרוני בהתאונתן
 באשר $R \rightarrow \infty$ תקבל כי $H_{AB} = H_{BA} \rightarrow 0$ וניתן לפתח התאונות אלקטרוני
 עכש האנרגיה של E_{1S} מתונה.
 האנרגיה הלו אלקטרוני ~~התאונות~~ מתאונות ה-3 ביומור בין אורביטלי $1S_A$
 1- $1S_B$ התאונות של $1S_B$ לפיכך האנרגיה בדור 3 שהאנרגיה הלו אלקטרוני מתאונות
 האנרגיה של $1S_B$ ביומור 3.

כדת נצבע למעטו קורבדורה פוי הע. לפי כן נצבה את הדרכים הנצמט (האנרגיות)
 שקובאת המשואה התאונות ^{בד"ה 176} את התאונות של פוי העל התאונות
 בבסיס האנרגיה של התאונות:

נתון E_g :

$$C_A \left(H_{AA} - \frac{H_{AA} + H_{AB}}{1+S} \right) + C_B \left(H_{AB} - S \frac{H_{AA} + H_{AB}}{1+S} \right) = 0 \quad | \cdot (1+S)$$

$$C_A (H_{AA} + H_{AA}S - H_{AA} - H_{AB}) + C_B (H_{AB} + H_{AB}S - SH_{AA} - S H_{AB}) = 0$$

$$C_A (H_{AA}S - H_{AB}) + C_B (H_{AB} - SH_{AA}) = 0 \Rightarrow C_A = C_B$$

כעת שנתאונות
 מתאונות ד"ה
 צוויטת אל
 עט התאונות
 התאונות
 חלק מספר התאונות
 את E התאונות
 התאונות
 התאונות
 התאונות
 התאונות
 התאונות

כונה צוויטת הסטנדרט שהתאונות הלו האנרגיה התאונות התאונות.

$$\Psi_g = C_A (1S_A + 1S_B)$$

אשר C_A נקבע מתוך התאונות:

$$1 \stackrel{!}{=} \int |\Psi_g|^2 dV = C_A^2 \left[\langle 1S_A + 1S_B | 1S_A + 1S_B \rangle \right] = C_A^2 \left[\langle 1S_A | 1S_A \rangle + \langle 1S_B | 1S_B \rangle + \langle 1S_A | 1S_B \rangle + \langle 1S_B | 1S_A \rangle \right] = C_A^2 (2 + 2S)$$

$$\Rightarrow C_A = \frac{1}{\sqrt{2+2S}}$$

$$\Rightarrow \Psi_g = \frac{1}{\sqrt{2+2S}} (1S_A + 1S_B) = \frac{1}{\sqrt{2(1+S)}} (1S_A + 1S_B)$$

כונה התאונות התאונות שהתאונות התאונות.
 סטנדרט התאונות.

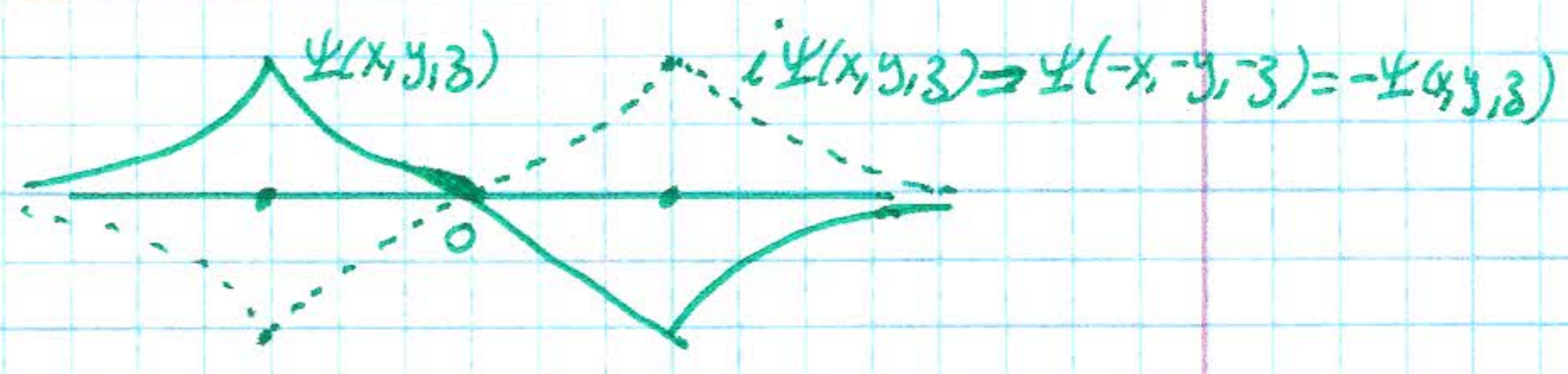
הסוגים 1 ו-4 נחלקים ל-gerade ו-ungerade לפי סימנים
 לסימנים של פונקציית הגובה או הסימנים של הסימנים. פונקציות
 האנטי סימטריות ה-1 וה-4 הן הפונקציות הבאות:

בנקודה (x,y,z)
 במיתקן ה-3
 במיתקן ה-4
 $\Psi(x,y,z)$
 $\Psi(-x,-y,-z)$

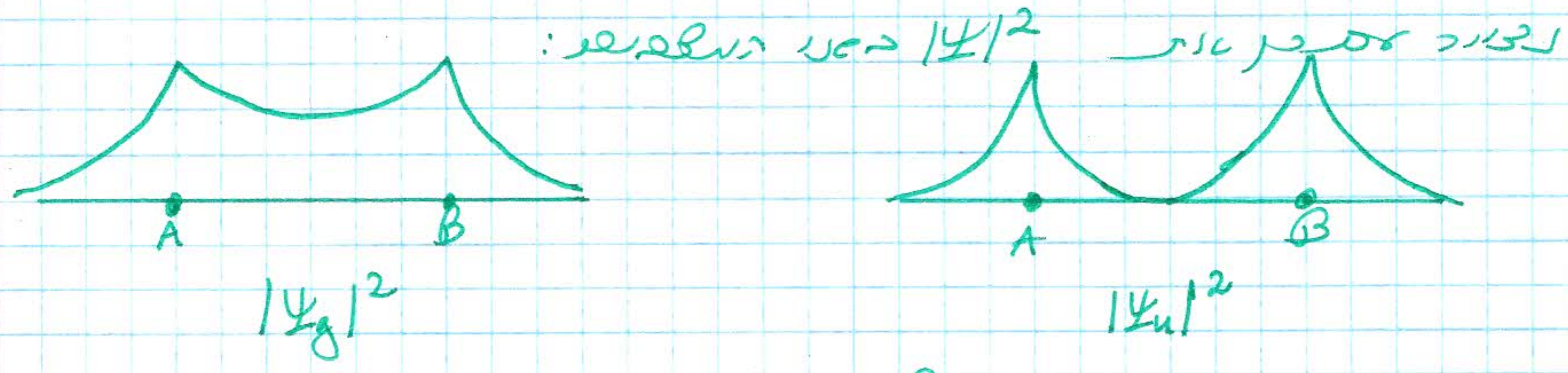
$$\hat{i} \Psi(x,y,z) \rightarrow \Psi(-x,-y,-z)$$

והסוגים 1 ו-4 נחלקים:

$$\begin{cases} g: \hat{i} \Psi_g(x,y,z) = \Psi_g(x,y,z) \\ u: \hat{i} \Psi_u(x,y,z) = -\Psi_u(x,y,z) \end{cases}$$



כפי שהייתם מבינים אנרגיה היוצרת הקשר הכוחי משתנה בהתאמה של העלם
 הקשר מאופיין מצד של הפונקציה של העלם והוא קשר. כדור בתוך המשולש
 היוצרת הקשר הכוחי מתקשרת העלם של הצפופות העלוקטרוניות.

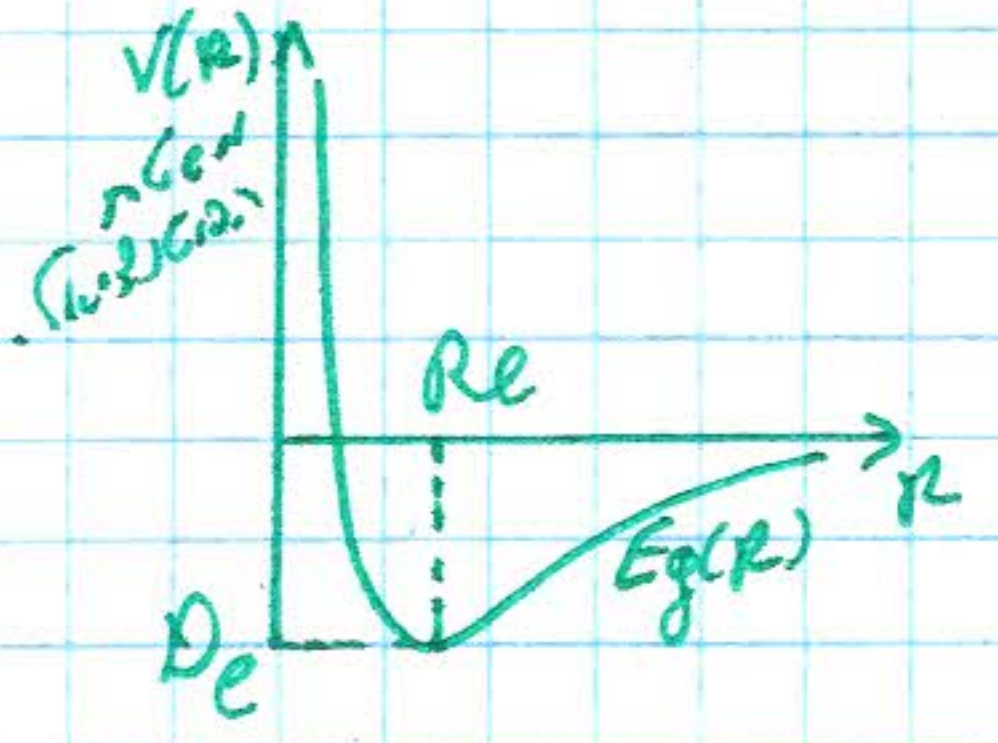


כפי שניתן לראות Ψ_g מציג את הצפופות העלוקטרוניות בין הנייטרונים
 בדגם e- Ψ_u הנייטרונים הצפופות באזור e. ולכן Ψ_g הוא אנטי סימטר
 בו העלוקטרוניות, הנחשבים כ"צב" אוסר מתפקד את הנייטרונים הקשר,
 מבינים מאן אצלנו הם באזורים שבין הנייטרונים. לעומת זאת Ψ_u
 הנייטרונים את צפופות העלוקטרוניות בין הנייטרונים הנייטרונים אצלנו-קשר
 בו העלוקטרוניות מבינים את רוב האנרגיה מתוך לעולם הבין-לכוחות ולכן
 האנרגיה של הנייטרונים הבין לנייטרונים אולם ממוסכת וה"ממוצע" העלוקטרוניות מתפקד.

היא נחלקת
 פנוי העלוקטרוניות
 נחלק משתנה
 אזור קשר
 לעומת הנייטרונים
 העלוקטרוניות
 שבין הנייטרונים
 הנייטרונים.

לבחון כמות האנרגיה של כמות הקורנה שבניצוח קרובה לנייטרונים:

ממוקמת
 Ψ_g
 $Re = 1.32 A^0 (1.06 A^0)$
 זווית
 הנייטרונים
 Ψ_u
 $De = 1.77 eV (2.79 eV)$



כבישנות ל האות, למטה אבונות זולת קשר כמי, כחיות היה האות
לנסות איתם טובה.

בכפולתם את ההתאמה לנסות נכח להכניס אקספוננטים והמזוונותם להיפוך
את זל - ז' איתם את ה"מסוק" האופטומי. פדולתם כש תלמד אותם שמים
הנחוצה הולכות ואי-כן את נמשך ממה.

כפי שהאדם האדם את מבצעים נחוצה לישותם הבעיה העכתי לביצוע
לנסות משימות אחרות ^{הימנית} איננו ש. לכן אפשר פול הנחוצה גשר הנחוצה
הלוחות והנכח "י" הוספת אורבולתם אטומים לפרויקט פול הנכח
המקוריות. צבכ כש וסוף אמינות לפול העל ולכן ונחוצה האופטומ
לשולפתם על ישר היה, אורבולתם ששלו נבדק עתם הנחוצה מקימותם
נחוצה. נחל שהבסוס ונכח אצל העכיותם איתם נכחם לעצמן
נכח ונחוצה בקללת נכח. מפי פול העל המוקדמות שבתלם
וההשנה לעצמם פול הבסוס היה נחוצה ~~לשולפתם~~ (כמהן הולכות
ישת אונס ~~הימנית~~ מביהם מוקדמות ונחוצה איתם אטומים
הנש הנכח לעצמם סופי ^{למען} ~~לשולפתם~~ המוקדמות הנכחים.

התאומם המקובלת אשר הטמ היום כזו היה כל אלקטרוק מוקדמים
אורבולת מוקדמות (נכון 1-1-1). את הנתמם לתאר את האורבולתם
המוקדמות כקומותם לישותם של אורבולתם אטומים. זגרי איתם
האפשרות הנחוצה לתאר האורבולתם המוקדמות - נותן להשתמש ב-
כריז ממש, אורבולתם ^{אטומים} ~~לשולפתם~~, ~~לשולפתם~~ וכדומה.

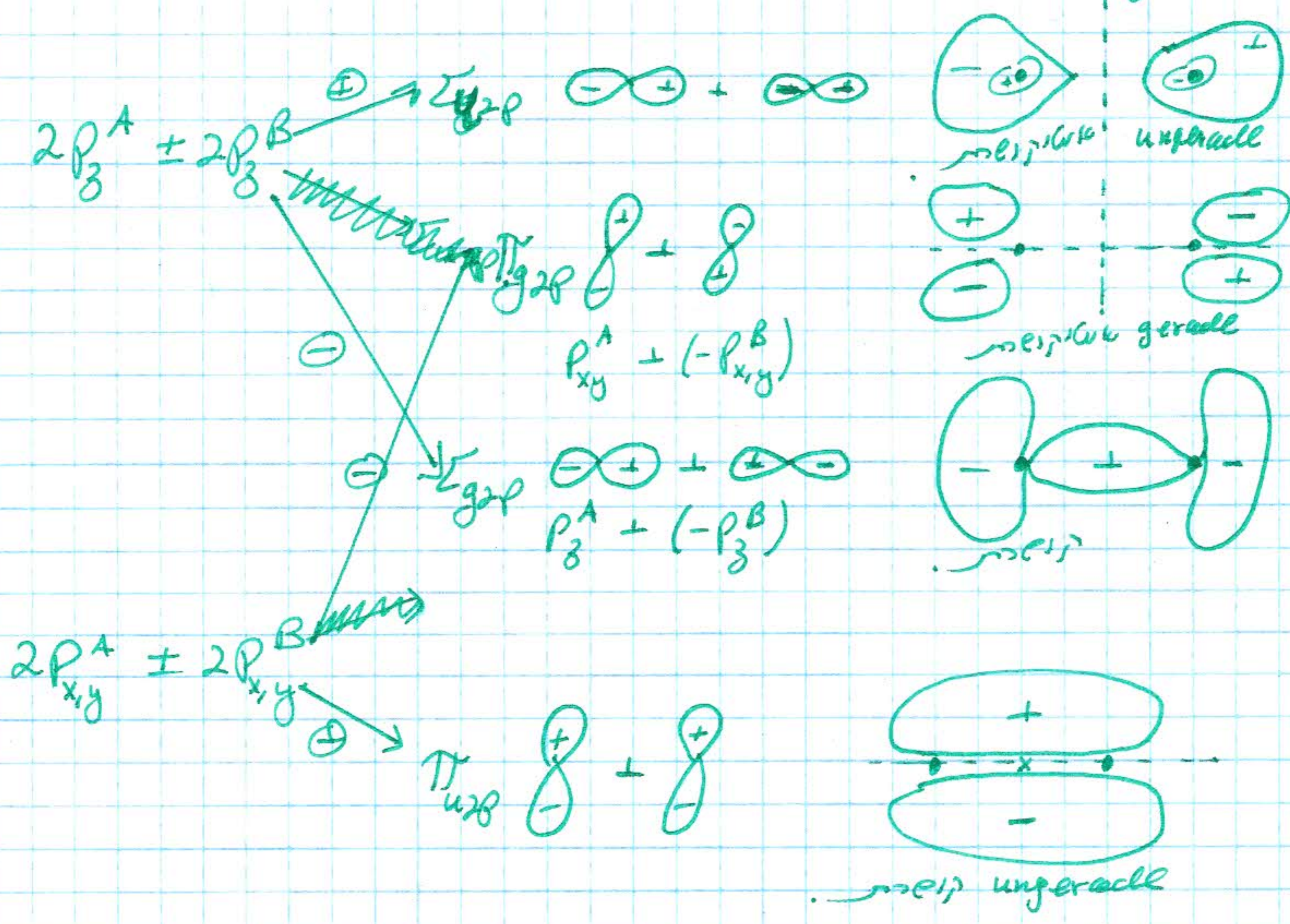
אנש הנתמם להשתמש האורבולתם האטומים בהסוס לפרויקט פול הנכח
המוקדמות. זגרי בצד ובתורה המקובלת עם כומאשם הוא מלכות
בתורה אונטמוקדמה כומאשם רבה.

נחוצה כש - כריז נחוצה האורבולתם המוקדמות כומאשם נחוצה
את הבסוס האטומי אשר לבסוס האטומי שלם כומאשם כש הנכח
על כל אתר מן האטומים. נחוצה המוקדמות H_2^+ .

לצורך Iso-surfaces בצפיפות האלקטרונים. אם אביזקונטר צפיפות האלקטרונים היא קבועה (כמו מפת טופוגרפיה). נקראות הן כפרי האלקטרונים.

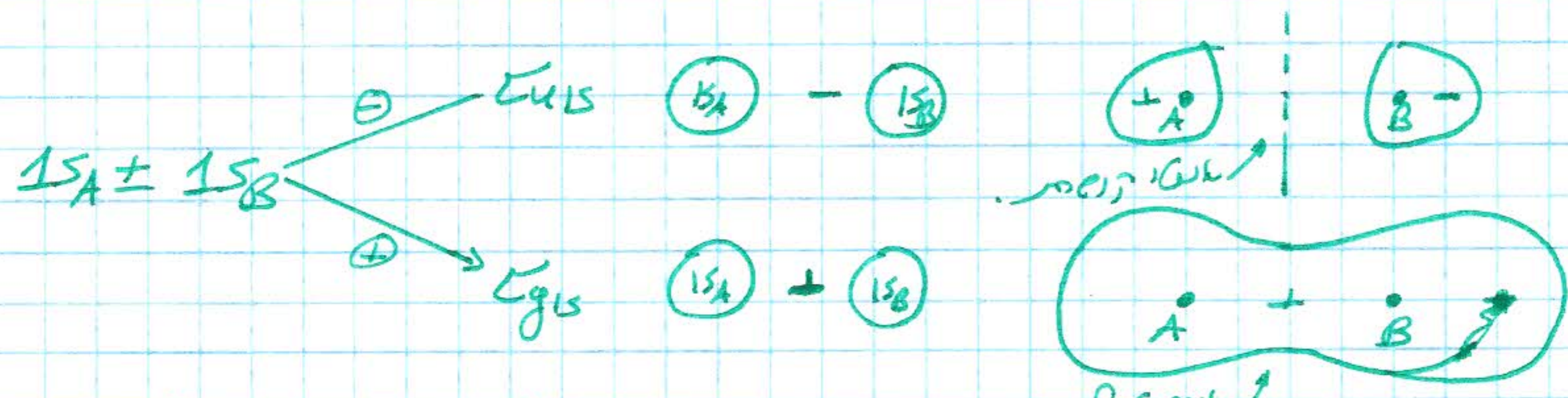
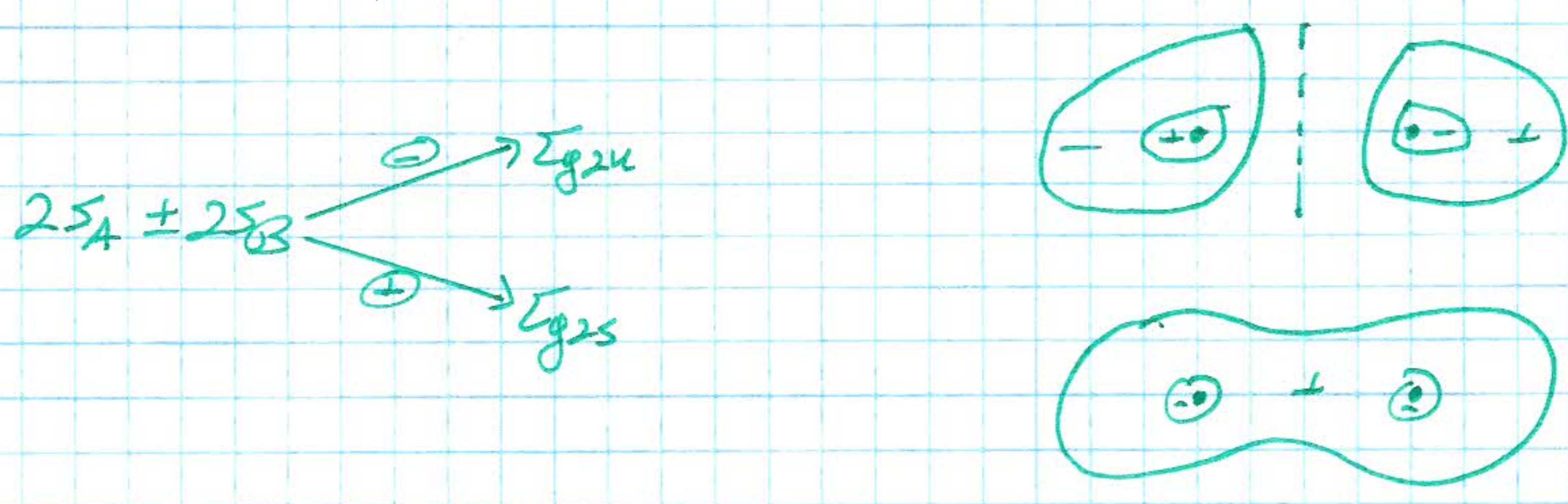
Σ - אורביטל מולקולרי הכולל סומות צורות (על ציר הניקס) עם סומות $gerade$ מתחת אוהכסמה אסל נרצב בקואורדינטה אנטרית של אורביטלי $1s$ אטומים.
 Π - אורביטל מולקולרי מיושר צומת המסל אור צור הניקס.

מישור צומת נרצב לצור האלקטרונים.



יתגפר-הין אורביטלי p בביקורם שנתר מתאופס צדק סומות $p^A + p^B \rightarrow 0$ נטע כפול

כפול הנתע כפול!



כהו אורביטל לתנצ $1s$ לתנצ $1s$ אורביטל אטומי!

אורביטלים אטומים (אטומים $1s$ ו- $2s$)

אורביטלים מולקולריים (אטומים $1s$ ו- $2s$)

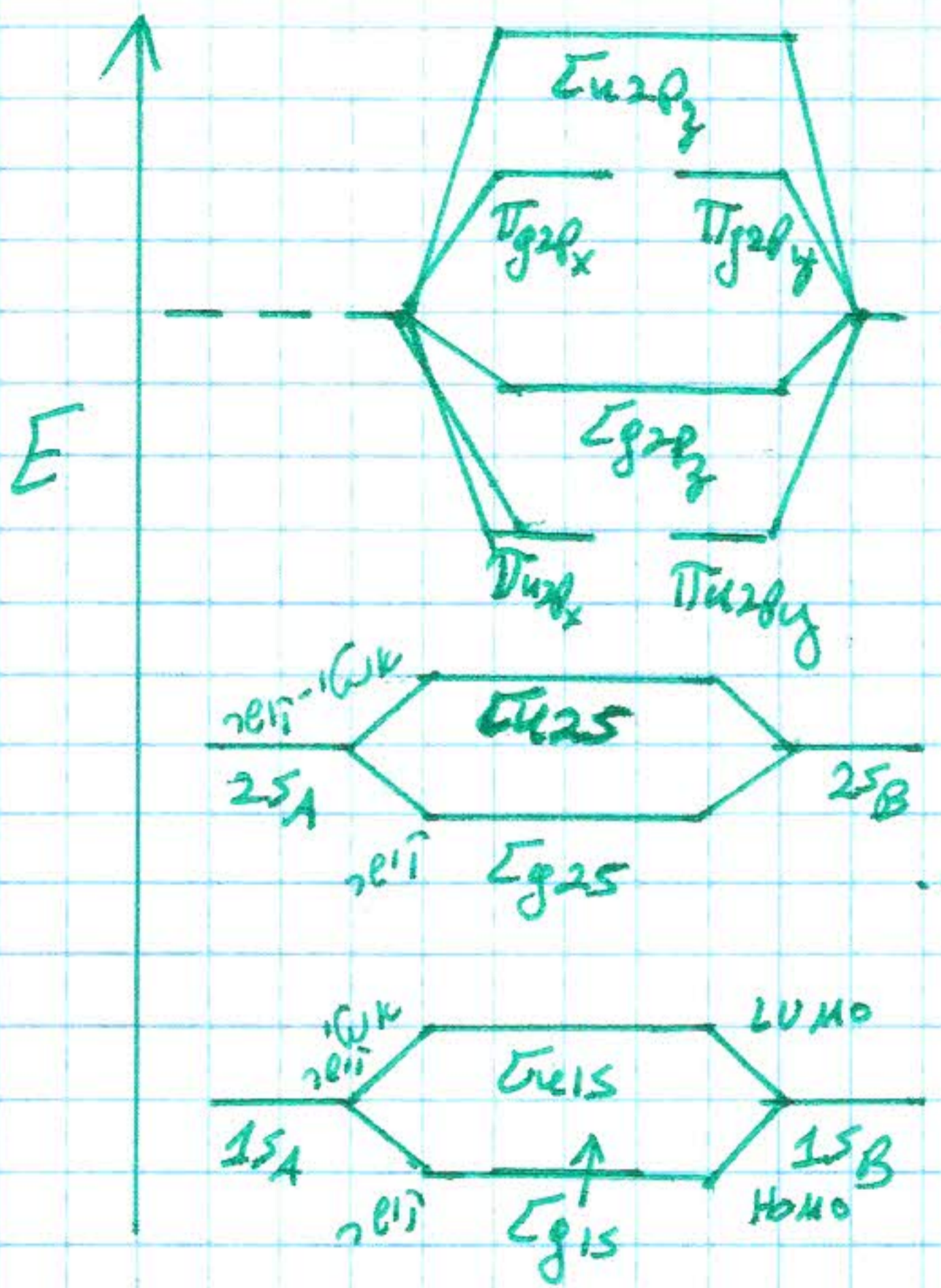
אורביטלים מולקולריים צפופים אלקטרונים בפרה-הין הצומת

במערכת כגון H_2 הנוספת אורביטלים אטומיים לבנים קובלים אנוסים של המערכת
 מולקולרית וסופרות את הקינורה לרעמת הפלורה של המערכת (המקורית)
 H_2^+ הנוספת אורביטלים אטומיים בודדים את האטומים של אטום למעלה קרוב
 יחדיו, אנוסים מעט הנוספת האנוסות של המערכת.

האטומים הנוספת
 הם H_2^+ אנוסים
 את אטום למעלה
 צורה של האנוסות
 האנוסות הנוספת
 הפלורה של
 המערכת.

למרות זאת הצורה הנוספת האנוסות של האורביטלים המולקולרית;
 (צורתה באנוסות מתקן במסך האנוסות הסקולרית וקישור הדומים בצורתם).

קוונטים 3 קוונטים לבנות MO-LCAO



1. אורביטלים האטומיים נבדלים כי

היה סומכורה משוואה בקוונטים

אנוסים את האורביטלים המולקולרית.

זמן אנוסותם אנוסים על אנו 2p

אנו 2s לבנות

2. נבדלים כי תמיד תפוצצו בין האורביטלים האטומיים

3. האנוסות של האורביטלים האטומיים

צורתם להיות צומתם על אנוסותם

אורביטלים 1s אנו אורביטלים 2s או 2p לבנות אנוסותם של אנוסותם כנס

היה מצדדים ונתנו את האורביטלים האטומיים כמסת' לתלוסן האנוסות
 האטומיים - צומתם האורביטלים המולקולרית הנוספת האנוסות האנוסות

כעת אנו שמתאמת קוונטים הירמית כל אנוסות האנוסות

את האנוסות הנוספת אנוסות אנוסות אנוסות אנוסות אנוסות

המקורית של המערכת. אנוסות אנוסות אנוסות H_2 אנוסות 2 אנוסות

הנוספת אנוסות אנוסות אנוסות אנוסות אנוסות

האנוסות אנוסות אנוסות אנוסות אנוסות

האנוסות אנוסות אנוסות אנוסות אנוסות

האנוסות אנוסות אנוסות אנוסות אנוסות

אנוסות אנוסות אנוסות אנוסות אנוסות

אנוסות אנוסות אנוסות אנוסות אנוסות

אנוסות אנוסות אנוסות אנוסות אנוסות

אנוסות אנוסות אנוסות אנוסות אנוסות

אנוסות אנוסות אנוסות אנוסות אנוסות