

מוליכות 3-טאומית הומוקלוארית רבות אלקטרונים

באשר ליפאט המדכבת אטומית המדבר מתאימה באופן המותן וטאומית-ה- $H_2$  לטופל באופן ה- $H_2$  דים מאומתו לפי שאת הפלי המיתמטי או קומט דים מאומת פליטת אשר עבור אטומית ה- $H_2$  קנליט את הצורה הפלאה:

$$\Psi_{H_2}^{(0)}(1,2,3) = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{vmatrix} 1s(1)\alpha(1) & 1s(1)\beta(1) & 2s(1)\alpha(1) \\ 1s(2)\alpha(2) & 1s(2)\beta(2) & 2s(2)\alpha(2) \\ 1s(3)\alpha(3) & 1s(3)\beta(3) & 2s(3)\alpha(3) \end{vmatrix}$$

פול 10, מצבות מכלל אורביטלים, היוותה את הקורות הפלאה בנות לפיטון (סכום מכללות) מלבד היוספ סאטומית ה- $H_2$  אשר מקיים את עקרון פאולי אטומית אשר בופרציות היתרית התלפת אלקטרונים.

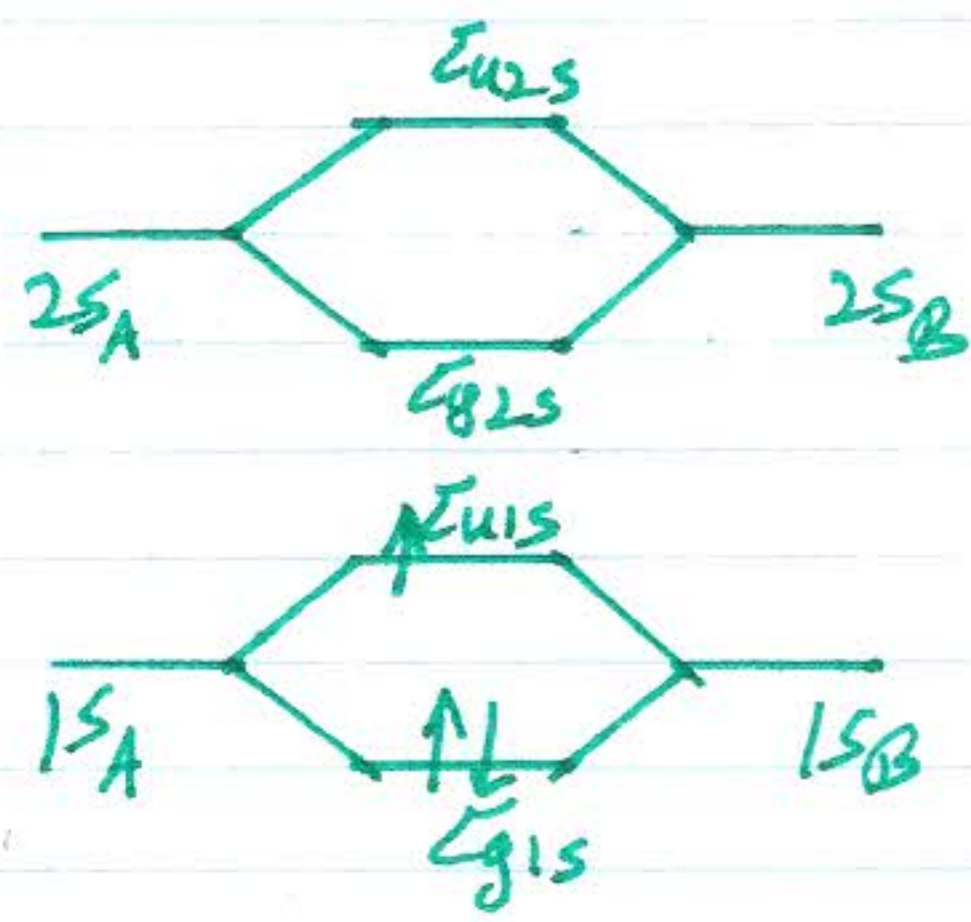
בהואם לטפל במדכבת מוליכות הומוקלוארית 3-אלקטרונים הומוקלוארית רבות אלקטרונים נשתמש באותו הפלי באשר את עקרון האורביטלים הטאומית במאנו מדכבת אטומית נחלפו האורביטלים המוליכותיים במדכבת המוליכותיות. יפ לכבר כי את האורביטלים המוליכותיים אנו בוחשים להצט כקומבונציה איטיות של אורביטלים אטומיים אך וכולא שלם לערב אורביטלים אטומיים שלם ולהשתמש בהצעות ובהסוסים אחרים לכרית האורביטלים המוליכותיים.

באטומית-הומוקלוארית במוליכותיות אטומית אטומית ה- $H_2$  מבתום מספר המוליכותיים נכלל לתבוע ה- $H_2^+$  או ה- $H_2^-$ . ההבדל באיפול במוליכותיות וניה במאן הצדית שמופד הן במוליכותיות והן בפופרציות הפלי המוליכותיות.

דטים מאומת סליט שיתמר מוליכותיות אלו תפיה:

$$\Psi_{H_2}^{(0)}(1,2,3) = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{vmatrix} 1s(1)\alpha(1) & 1s(1)\beta(1) & 1s(1)\alpha(1) \\ 1s(2)\alpha(2) & 1s(2)\beta(2) & 1s(2)\alpha(2) \\ 1s(3)\alpha(3) & 1s(3)\beta(3) & 1s(3)\alpha(3) \end{vmatrix}$$





הצטננות ורמת הקב:

אסר הקשר של  $H_2^-$  (אשל  $He_2^+$ ) והיה:  $B.O. = \frac{2-1}{2} = \frac{1}{2}$   
 כלומר מולקולת  $H_2^-$  קושרת פחות טוב מ- $H_2$  וצומה  $H_2^+$ .

מולקולת  $He_2$

האקוויולנט האטומי של מולקולת  $He_2$  מבחינת מספר האלקטרונים הוא אולם ה-Be (בחינים). צטננותה של סלילת שתי קוונט מספר אפס אולם

צב היסוד:

$$\Psi_{He}^{(0)}(1,2,3,4) = \frac{1}{\sqrt{24}} \begin{vmatrix} 1s(1)\alpha(1) & 1s(1)\beta(1) & 2s(1)\alpha(1) & 2s(1)\beta(1) \\ 1s(2)\alpha(2) & 1s(2)\beta(2) & 2s(2)\alpha(2) & 2s(2)\beta(2) \\ 1s(3)\alpha(3) & 1s(3)\beta(3) & 2s(3)\alpha(3) & 2s(3)\beta(3) \\ 1s(4)\alpha(4) & 1s(4)\beta(4) & 2s(4)\alpha(4) & 2s(4)\beta(4) \end{vmatrix}$$

ואנלוגית עבור מולקולת  $He_2$  נשתמש בקונפיגורציה אטומית-מטתית להיתקפת מולקולתית  
 מבצורה:

$$\Psi_{He_2}^{(0)}(1,2,3,4) = \frac{1}{\sqrt{24}} \begin{vmatrix} \sigma_{g1s}(1)\alpha(1) & \sigma_{g1s}(1)\beta(1) & \sigma_{u1s}(1)\alpha(1) & \sigma_{u1s}(1)\beta(1) \\ \sigma_{g1s}(2)\alpha(2) & \sigma_{g1s}(2)\beta(2) & \sigma_{u1s}(2)\alpha(2) & \sigma_{u1s}(2)\beta(2) \\ \sigma_{g1s}(3)\alpha(3) & \sigma_{g1s}(3)\beta(3) & \sigma_{u1s}(3)\alpha(3) & \sigma_{u1s}(3)\beta(3) \\ \sigma_{g1s}(4)\alpha(4) & \sigma_{g1s}(4)\beta(4) & \sigma_{u1s}(4)\alpha(4) & \sigma_{u1s}(4)\beta(4) \end{vmatrix}$$

והצטננות הימית נקב:

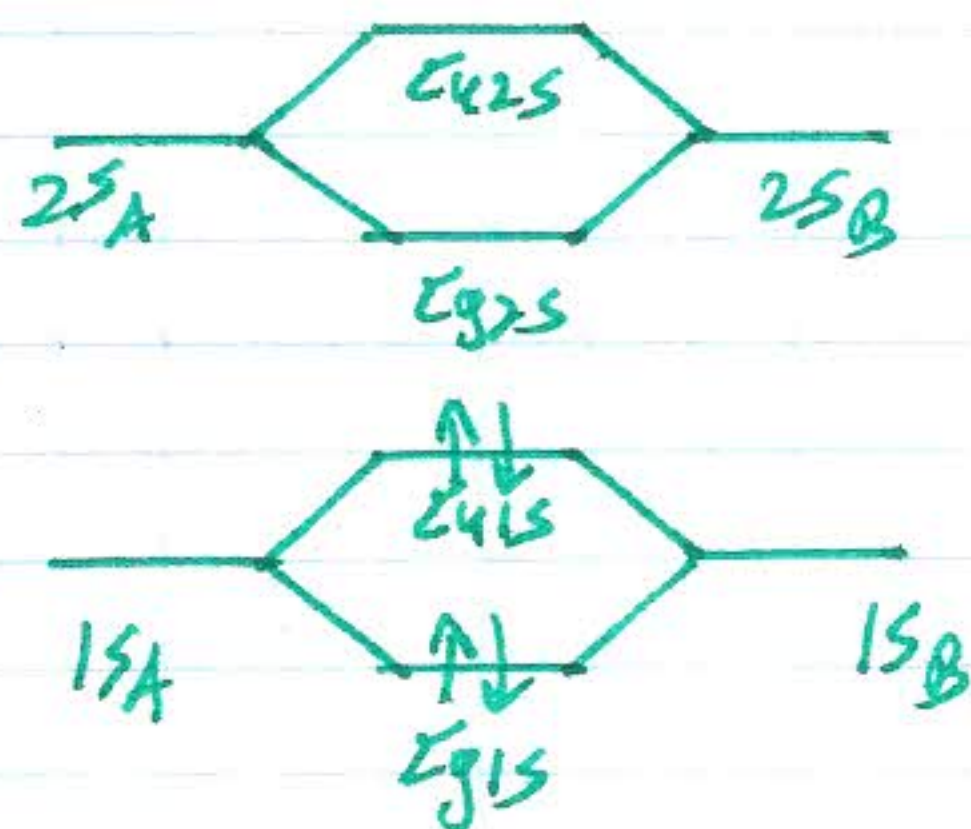
אסר הקשר עבור  $He_2$  היה  $B.O. = \frac{2-2}{2} = 0$

כלומר  $He_2$  המשל שלם וצטננות קושר כיוו.

בפועל אונטם קושר כיוו קוולנטי אוק קושר

קושר תלם דקה כמות ון-צב-וולס בין אטומי ה-He.

(כמות צמוד הבא בהסבר עבור  $Be_2$ )









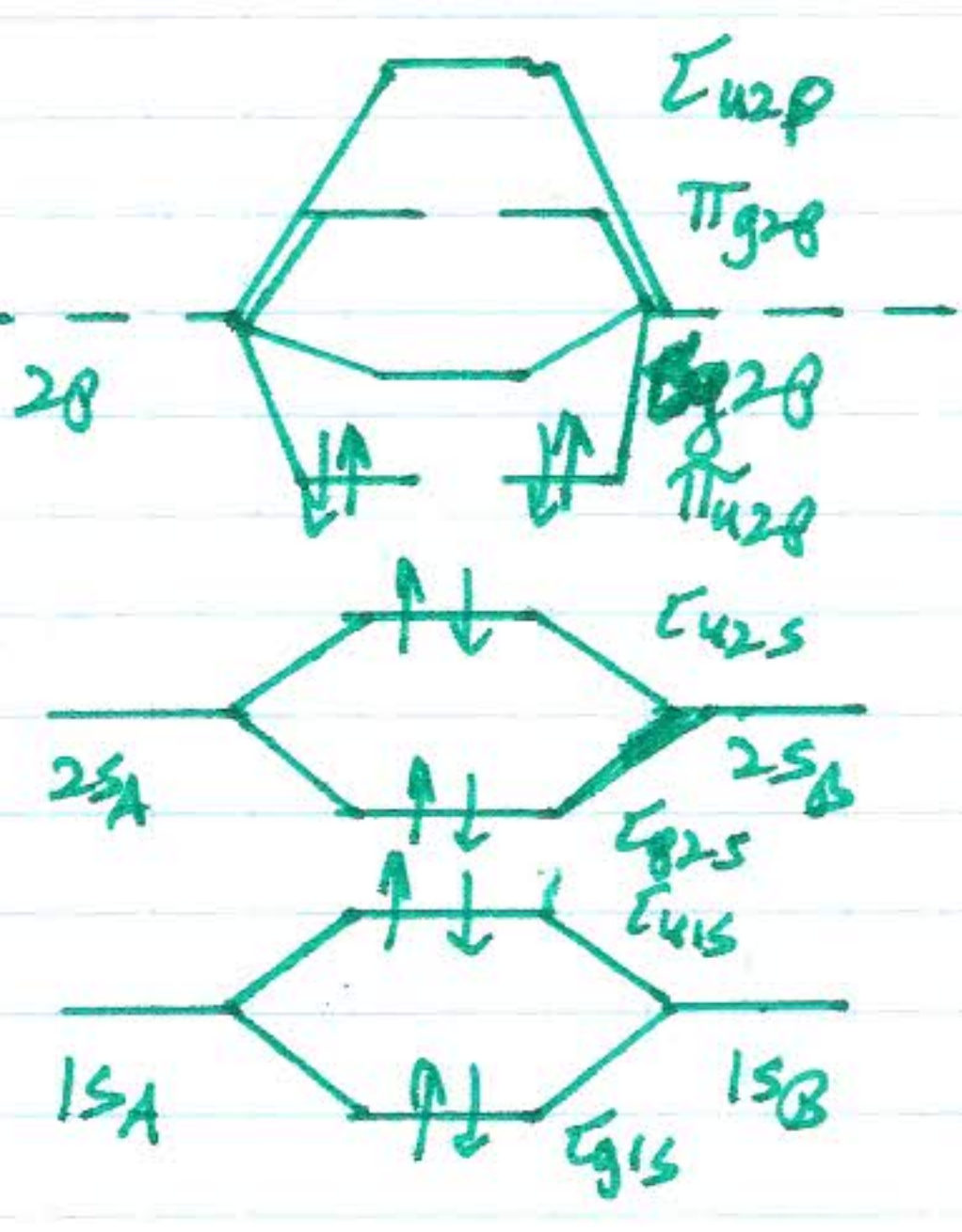
מולקולת  $E_2$

$B.O. = \frac{8-4}{2} = 2$

סדר הקשר הוא

בלווי צבו קשר כפול.

הסיבה של מוצאוש מולקולות  $E_2$  היא שמוצק פחמני כגון ויילופ וכפול אצל פולריטש כגון  $E_2$  מאוסף שתיים  $E_2$  וצורה יתם מולקולות  $E_2$  להתוועאונגות.



מולקולת  $N_2$

במולקולה זו צע המולקולרונש הנעם ואכלס את תרמה  $E_{g2p}$ .

בתלופת תוים תלופת סערה וצפן מצב הספון הנוסעמלי. סדר הקשר הוא 3

בלווי הקשר הוא קשר משולש אשר מבד הקשר סוממא ותוד קצף ושל קשרי

קצף מכונש כניון צור  $X-1$  וצבוש בתמה.  $N \equiv N$

צמדשה במולקולה זו הסדר המולרלי בין קצף זבין קצף מתפק

להעש המדוכר הנוסון הוא  $10$  וצבא לבוק המשפ תייסונ 3.

מולקולת  $O_2$

של המולקולרונש הנעספם ואכלס את האורבולאלש המולקולרונש קצף

וויצבו  $1$  כרופלי המעק באעשה מן הסועמלי. סדר הקשר הוא 2 וקשר

הוא קשר כפול. הפודוקצנה שמולקולה זו תמה באורבולאלש הוויב את

ההוכתות התשובות לתקנות של תמה האורבולאלש המולקולרונש המקוררת

מולקולת  $F_2$

של המולקולרונש הנעספם ואכלס את קצף ולפן ולפ תייסונ והיה

סעמלי וסדר הקשר והיה 1 - בלווי הקשר והיה תלם ויתם מושר הקשר ה-  $O_2$

ואניק הקשר והיה צפול ויתם.

מולקולת  $Ne_2$

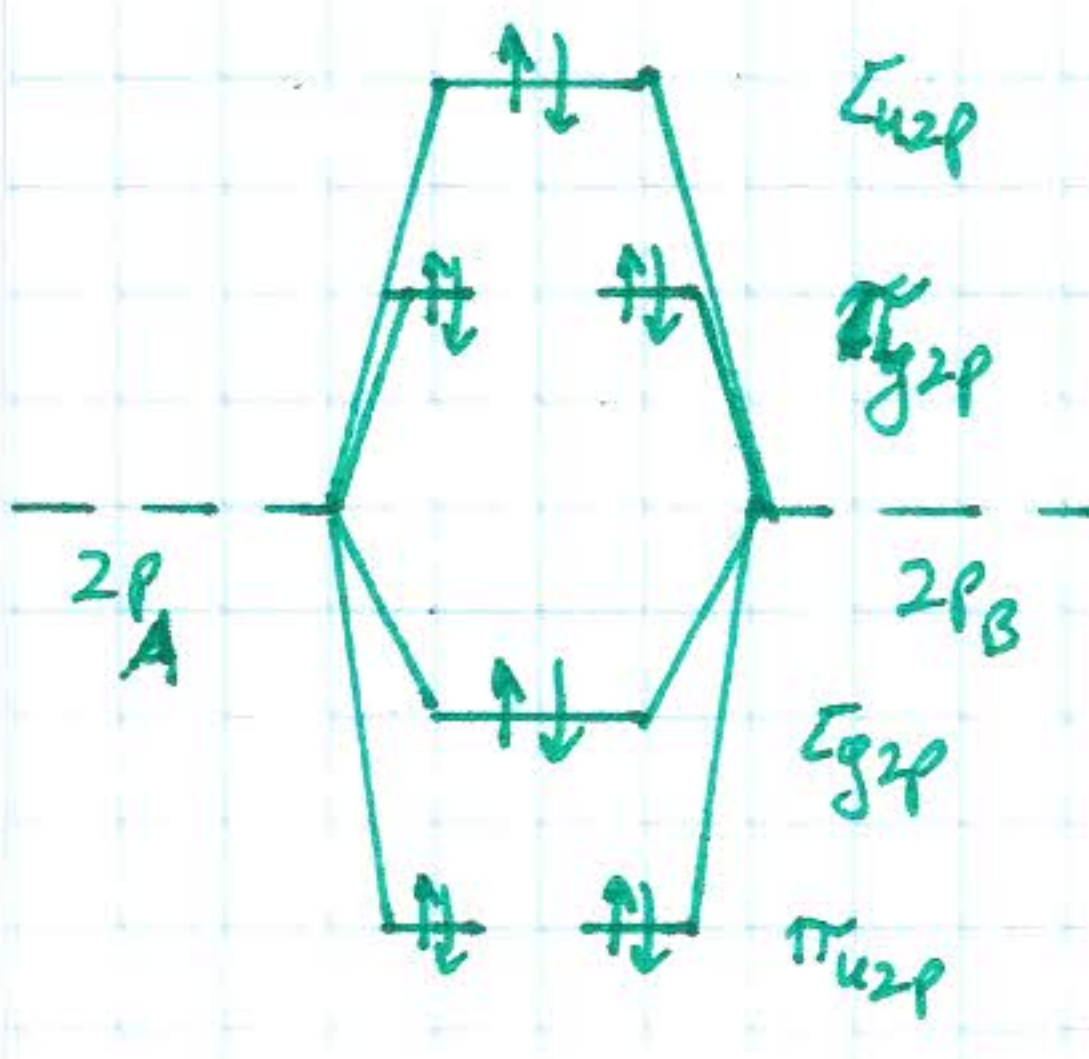
של המולקולרונש הנעספם ואכלס את האורבולאלש המולקולרונש קצף, סדר הקשר הוא 0

ואוועש קשר קועמלי.

\* התואר שנתמ הוא תואר אוכורתי. כחוקן שפכים עישש את צי המועמל סיויכר ולתשה ומעוונות את התאוששה באמצעות הקיחה צור.



196  
 סיכום מולקולות 13-טלומטר הומי-גוק, לרבות.



מולקולה	סדריתקסר	הצורה
$N_2$	0	טון קיסר קוולטי-טז אוצול.
$F_2$	1	קסר יתוד כמצנספת דבור מולקולת $F_2$ הוועת.
$O_2$	2	
		קסר כסל, מצב ויסנז סנופטי, טארקמטו.
$H_2$	3	קסר משולש תצק מלד וקצנה מלוד. הסדר הטנטי סלמטוד ו-קנסל מבעק!
$C_2$	2	לונמטו כק בטבד דק הוועת הינה סל הוועקש והצפנונסט וסל פולנש ונמטובס.
$B_2$	1	קויעה סתגתה - מצב ספון סנופטי.
$Be_2$	$\frac{4-4}{2} = 0$	לו ננצב קסר קוולטי דבור מולקולת $Be_2$ . נימל מלעטו דומיעדק קסרי מלד קטמפולרית נמוכת.
$Li_2$	$\frac{4-2}{2} = 1$	
$He_2$	$\frac{2-2}{2} = 0$	לונמט קסר קוולטי דבור הוועקש.
$H_2$	$\frac{2-0}{2} = 1$	סציקסר 1 - קסר אוצול.

