

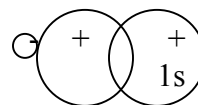
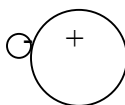
: Valence Bond

את המבנה האלקטרוני של מולקולות פוליאטומיות ניתן לתאר ע"י השיטות הקודמות שתיארנו, אך במולקולות כאלו אני נקבל אנרגיה התלויה בהרבה מרחקים תוך מולקולריים ובזוויות. ולכן כאשר מסתמכים על ש"מ גיאומטרי מצמצמים את התלות הזו. המילים אחרות זו שיטה נוספת לתיאור מתמטי של מולקולה. שיטה זו מבוססת על הרעיון שקשר כימי נוצר כאשר יש חפיפה טובה בין האורביטלים האטומיים. זו שיטה המתארת את כל המערכת רק ע"י אלקטרוני הערכיות של האטומים שכן אלו האלקטרונים שיוצרים את הקשרים.

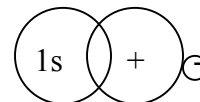
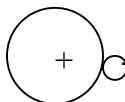
ניקח לדוגמה את המולקולה BeH_2 :

הסכמה של המולקולה: H-Be-H. זווית הקשר היא 180° , כלומר קשר פלנרי. האלקטרונים של המימן המשתתפים בקשר הם אלקטרונים הנמצאים באורביטל $1s$, האלקטרונים של Be המשתתפים בקשר הם אלו הנמצאים באורביטלים $2s$ $2p$, ולכן אנו נחפש את ההכלאה המולקולרית של אורביטלים אטומיים אלו. ואז נבנה את פונקציות הגל עפ"י זה אלו הן פונקציות הגל וזה התיאור הגרפי :

$$\Psi_{sp(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(2s + 2p_z)$$



$$\Psi_{sp(2)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(2s - 2p_z)$$

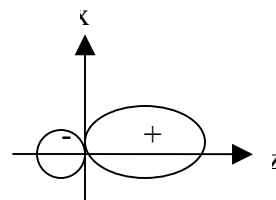


כאשר לכל אחד מהאורביטלים יש מקדם נרמול, אשר מחושב בדרך שכל מקדמי הנרמול חושבו עד כה. כך למעשה מצאנו את ההכלאה של שני האורביטלים האטומיים של Be, וכעת ע"י קומבינציה לינארית עם האורביטלים של מימן נקבל את פונקציות הגל של המולקולה.

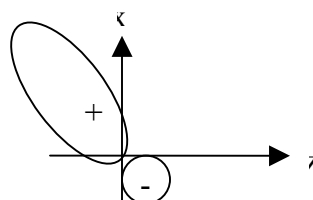
הרעיון הוא להשתמש בבסיס סופי שיתרום כמה שיותר, ולכן נבחר את פונקציות הגל שתרמו לקשר הכי הרבה.

המולקולה BH_3 מורכבת משלושה קשרי B-H, היושבים המישור עם זווית של 120° . האלקטרונים של אטום הבור המשתתפים בקשר נמצאים באורביטלים $2s$ $2p$. שוב יש צורך ליצור אורביטל חדש משני אורביטלים אלו ע"מ לתאר את הקשר.

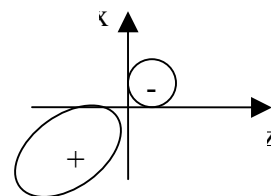
$$\Psi_{sp^2}(1) = \frac{1}{\sqrt{3}}2s + \sqrt{\frac{2}{3}}2p_z$$



$$\Psi_{sp^2}(2) = \frac{1}{\sqrt{3}}2s + \frac{1}{\sqrt{2}}2p_x - \frac{1}{6}2p_z$$



$$\Psi_{sp^2}(3) = \frac{1}{\sqrt{3}}2s - \frac{1}{6}2p_z - \frac{1}{\sqrt{2}}2p_x$$



נחזור ונדגיש כי הרעיון העומד מאחורי שיטה זו הוא שבמקום לעבוד עם אורביטלים מולקולריים אנו עובדים עם הכלאות של אורביטלים אטומיים.

ניקח לדוגמה את המולקולה He_2 :

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{24}} \begin{vmatrix} 1s_1(1)\alpha(1) & 1s_1(1)\beta(1) & 1s_2(1)\alpha(1) & 1s_2(1)\beta(1) \\ 1s_1(2)\alpha(2) & 1s_1(2)\beta(2) & 1s_2(2)\alpha(2) & 1s_2(2)\beta(2) \\ 1s_1(3)\alpha(3) & 1s_1(3)\beta(3) & 1s_2(3)\alpha(3) & 1s_2(3)\beta(3) \\ 1s_1(4)\alpha(4) & 1s_1(4)\beta(4) & 1s_2(4)\alpha(4) & 1s_2(4)\beta(4) \end{vmatrix}$$

אחד האיברים המתקבלים: $1s_1(1)\alpha(1)1s_1(2)\beta(2)1s_2(3)\alpha(3)1s_2(4)\beta(4)$
 איבר זה מתאר את המצב הקוולנטי של הקשר. למעשה כל האיברים שנקבל יהיו כאלה המתארים מצבים קוולנטיים, כלומר שיטת VB לוקחת בחשבון רק את החלק הקוולנטי של דטרמיננטת סלייטר בשיטת ה-MO-LCAO.