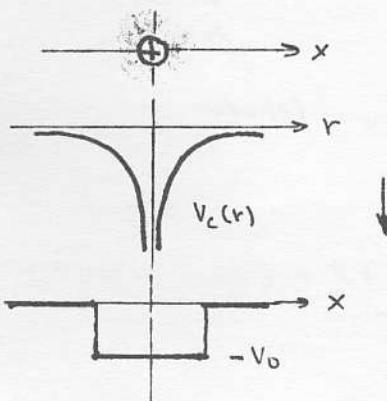


1.6. A kovalens kémiai kötés1.6.1. A molekulapályák1.6.1.1. Egydimenziós modell

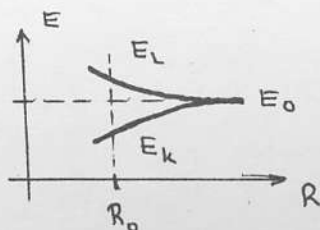
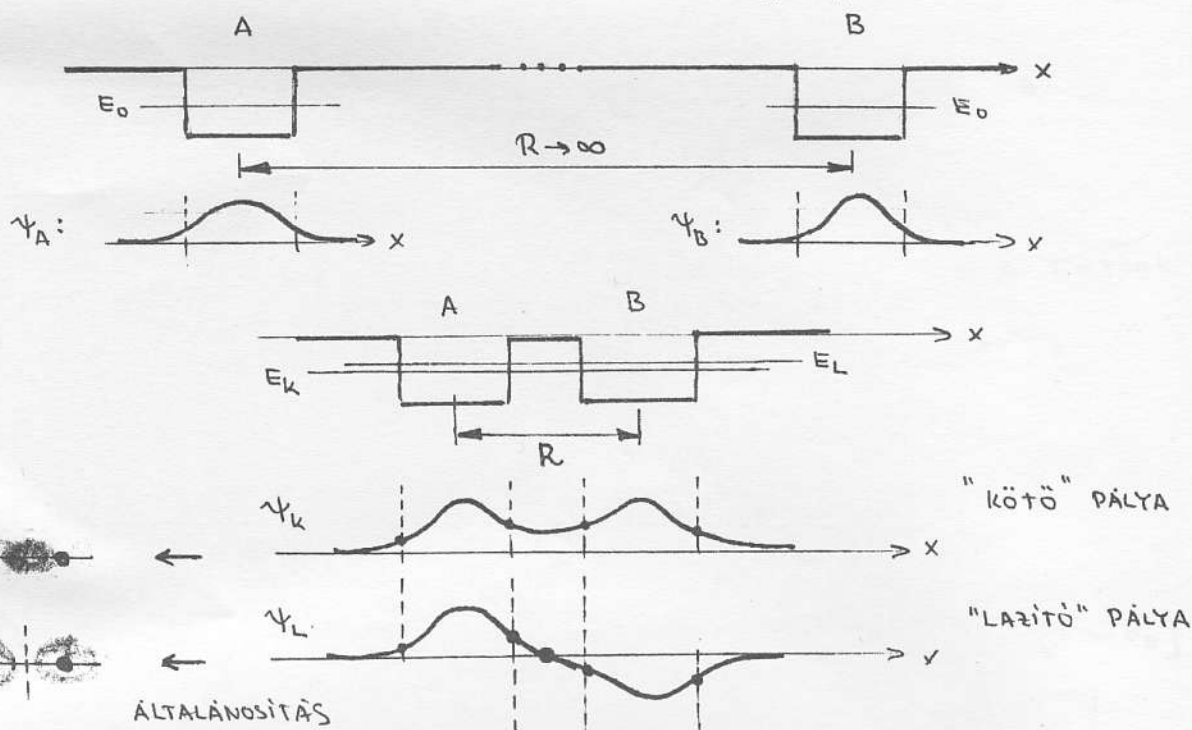
Kettős potenciálvölgy kvalitatív tárgyalása

A MODELL definiálása:



egydimenziós potenciál völgy:

Egyetlen elektron kettős potenciál völgyben:



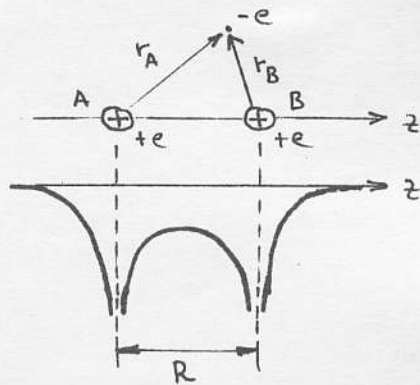
közelítő számolás:

$$\psi_L \approx \psi_A - \psi_B$$

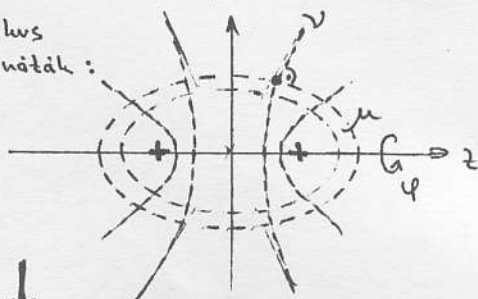
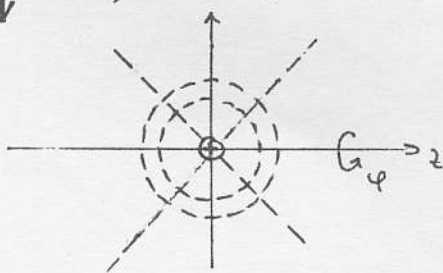
$$\psi_k \approx \psi_A + \psi_B$$

ÁLTALÁNOSÍTÁS:

↓ atompályák
↓ molekulapályák

1.6.1.2. A hidrogénmolekula ion (H_2^+)

elliptikus koordináták:

 $R \rightarrow 0$ 

$$\hat{H} = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - V_c(r_A) - V_c(r_B) + V_c(r)}_{\equiv \hat{H}_0}$$

$$V_c(r) \equiv \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r}$$

Az elektron állapotok {molekulapályák}

$$\hat{H}_0 \psi = E_0 \psi \quad \psi(\vec{r})$$

$$\left. \begin{aligned} \nu &\equiv \frac{r_A + r_B}{2} \\ \mu &\equiv \frac{r_A - r_B}{2} \\ \varphi \end{aligned} \right\} \rightarrow \psi(\nu, \mu, \varphi)$$

Egzaktil megoldható (separálás)

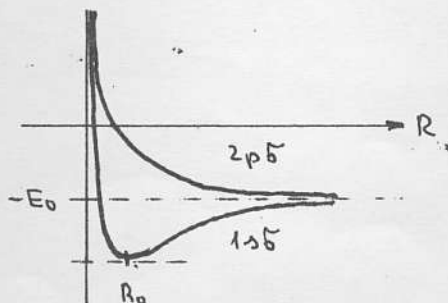
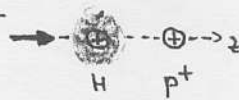
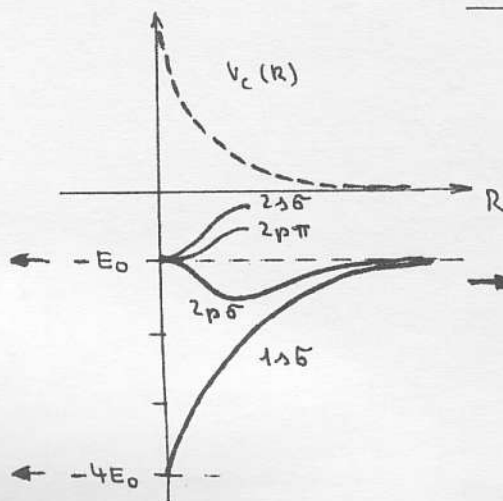
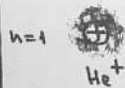
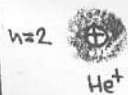
$$\psi(\nu, \mu, \varphi) = N(\nu) \cdot M(\mu) \cdot \Phi(\varphi)$$

$$\left\{ \begin{aligned} n &= 1, 2, 3, \dots \\ l &= 0, 1, 2, 3, \dots \\ m_l &= 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l \end{aligned} \right. \rightarrow L_z$$

JELÖLÉSEK:

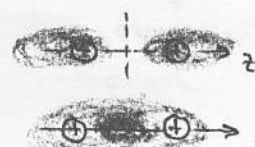
$$l = \left\{ \begin{aligned} &0, 1, 2, \dots \\ &\gamma, p, d, \dots \end{aligned} \right. \quad |m_l| = \left\{ \begin{aligned} &0, 1, 2, \dots \\ &\delta, \pi, \sigma, \dots \end{aligned} \right.$$

$$\left\{ \begin{aligned} 1\gamma\delta \\ 2\gamma\delta \\ 2p\delta \\ 2p\pi \\ \vdots \end{aligned} \right.$$

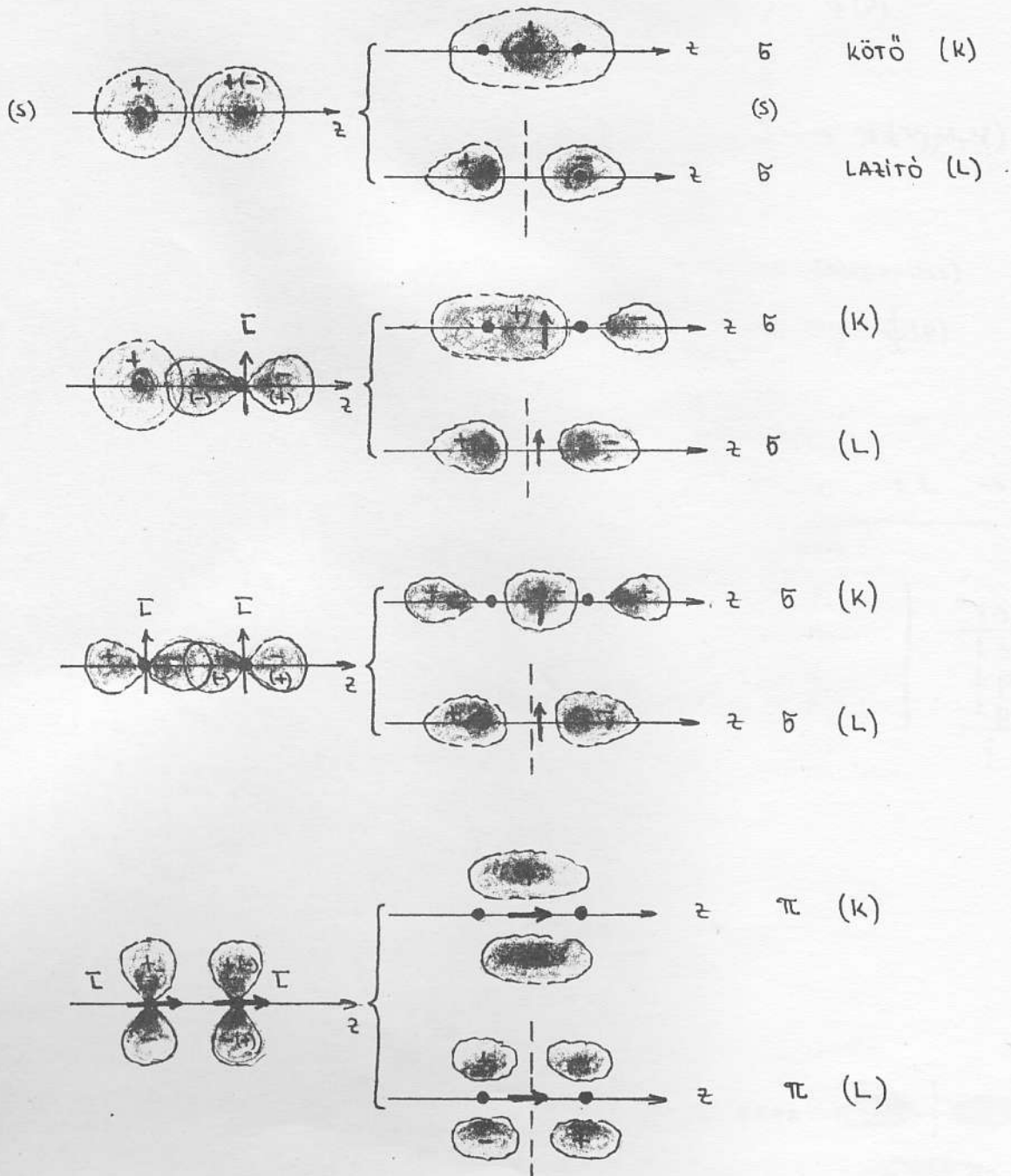
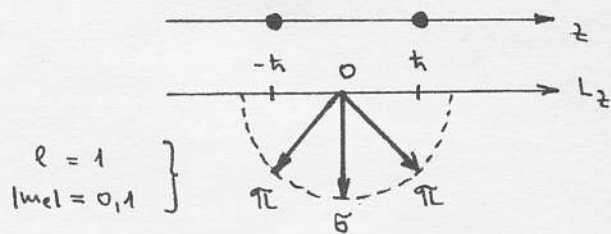


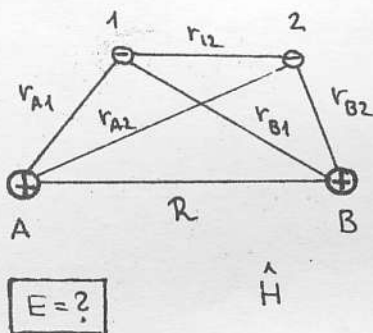
→ LAZÍTÓ PÁLYA:

→ KÖTŐ PÁLYA:



1.6.2. A molekulapályák felépítése atompályákból



1.6.3. A hidrogénmolekula (H_2)

Coulomb kölcsönhatások:

$$V_c(r) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{1}{r}$$

$$\hat{H}\Phi(\bar{x}_1, \bar{x}_2) = E\Phi(\bar{x}_1, \bar{x}_2)$$

$$\bar{x}_i \equiv (\bar{r}_i, \bar{z}_i)$$

$$\Phi(\bar{x}_1, \bar{x}_2) = -\Phi(\bar{x}_2, \bar{x}_1)$$

$$\hat{H} = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_1 - V_c(r_{A1}) - V_c(r_{B1})}_{\equiv \hat{H}_0(1)} - \underbrace{\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_2 - V_c(r_{A2}) - V_c(r_{B2})}_{\equiv \hat{H}_0(2)} + \underbrace{V_c(r_{12})}_{\text{elektronok közötti kölcsönhatás}} + \underbrace{V_c(R)}_{\text{protonok közötti kölcsönhatás}}$$

\uparrow (H_2^+)
 \uparrow (H_2^+)

Durva közelítés: az elektronok nem hatnak egymásra $V_c(r_{12}) \approx 0$

$$\left[\hat{H}_0(1) + \hat{H}_0(2) + V_c(R) \right] \Phi(\bar{x}_1, \bar{x}_2) = E\Phi(\bar{x}_1, \bar{x}_2)$$

spin-pálya kölcsönhatást elhanyagoljuk $\rightarrow \Phi(\bar{x}_1, \bar{x}_2) = \Psi(\bar{r}_1, \bar{r}_2) \cdot \chi(\bar{z}_1, \bar{z}_2)$

$$\Phi_a(\bar{x}_1, \bar{x}_2) = \begin{cases} \Psi_a(\bar{r}_1, \bar{r}_2) \cdot \chi_s(\bar{z}_1, \bar{z}_2) & \uparrow\uparrow \\ \Psi_s(\bar{r}_1, \bar{r}_2) \cdot \chi_a(\bar{z}_1, \bar{z}_2) & \uparrow\downarrow \end{cases}$$

A sajátérték egyenlet szeparálható

$$\left[\hat{H}_0(1) + \hat{H}_0(2) \right] \Psi_s(\bar{r}_1, \bar{r}_2) = \underbrace{(E - V_c(R))}_{\equiv E'} \cdot \underbrace{\Psi_s(\bar{r}_1, \bar{r}_2)}_{\Psi_k(\bar{r}_1) \Psi_k(\bar{r}_2)}$$

$$\Psi_k(\bar{r}_1) \Psi_k(\bar{r}_2) \rightarrow \underline{E' = \min}$$

Az elektronok közötti kölcsönhatás (közelítő) figyelembevétele (pl: Hartree)

$$E \approx \langle \Psi_s(\bar{r}_1, \bar{r}_2) | \hat{H} | \Psi_s(\bar{r}_1, \bar{r}_2) \rangle$$

$$\uparrow$$

$$\Psi_k(\bar{r}_1) \Psi_k(\bar{r}_2) \rightarrow \text{SCF megoldások!}$$

EGYÉB MÓDSZEREK