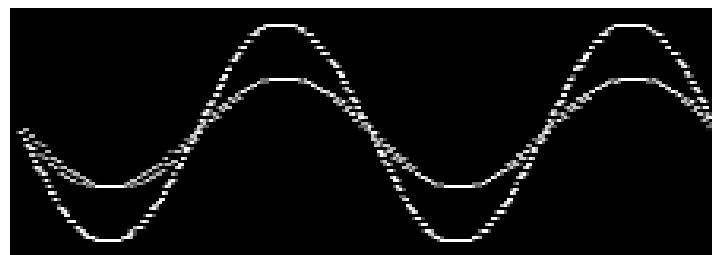


## ТЕОРИЈА НА МОЛЕКУЛСКИ ОРБИТАЛИ

- Брановите равенки за речиси сите молекули се премногу сложени за да можат да се решат точно. Затоа, се користат приближни (апроксимативни) методи. Еден таков метод е **Линеарната Комбинација на Атомските Орбитали** (скратено ЛКАО; во англиската литература: LCAO).
- Тој се состои во собирање на поединечните бранови функции кои соодветствуваат на атомските орбитали, секоја помножена по една константа којашто е во врска со уделот на соодветната атомска орбита во новообразуваната молекулска орбита.

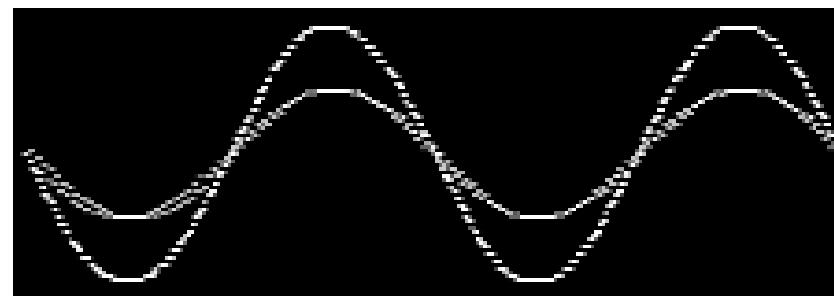


# LCAO

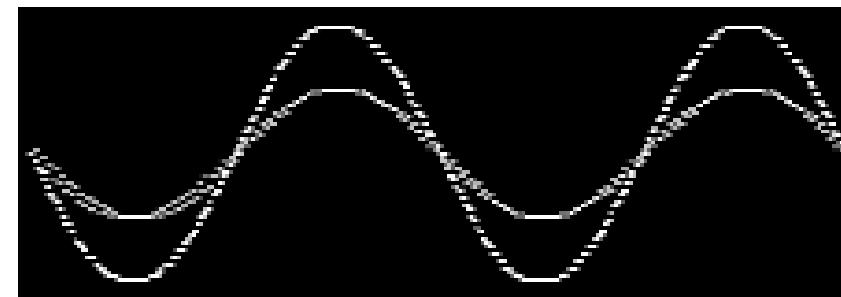
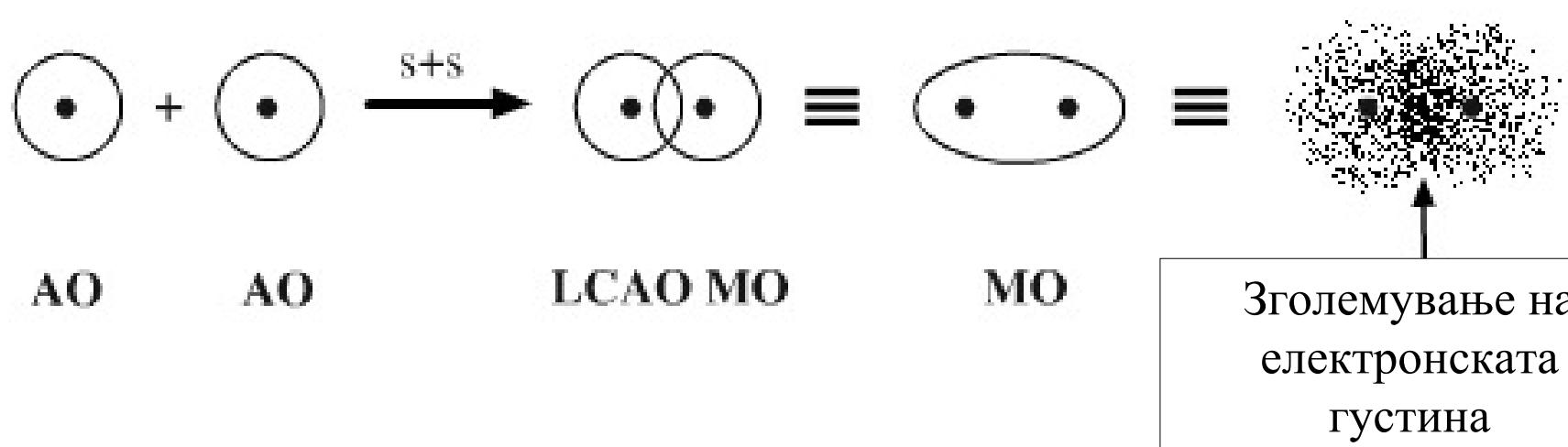
$$\Psi_{\text{MO}} = a \cdot \Psi_{\text{AO1}} + b \cdot \Psi_{\text{AO2}}$$

$$\Psi_{\text{MO}} = \Psi_1 + \Psi_2$$
 Сврзувачка орбитала

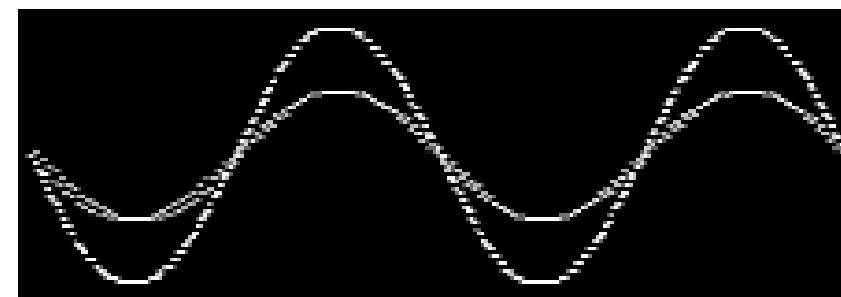
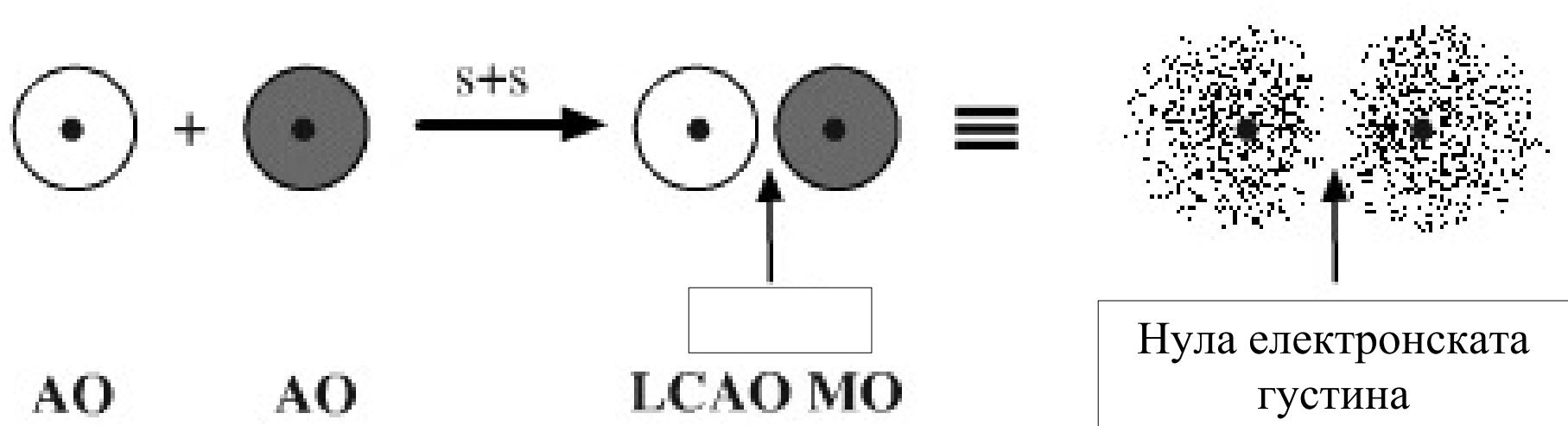
$$\Psi_{\text{MO}}^* = \Psi_1 - \Psi_2$$
 Антисврзувачка орбитала



## LCAO

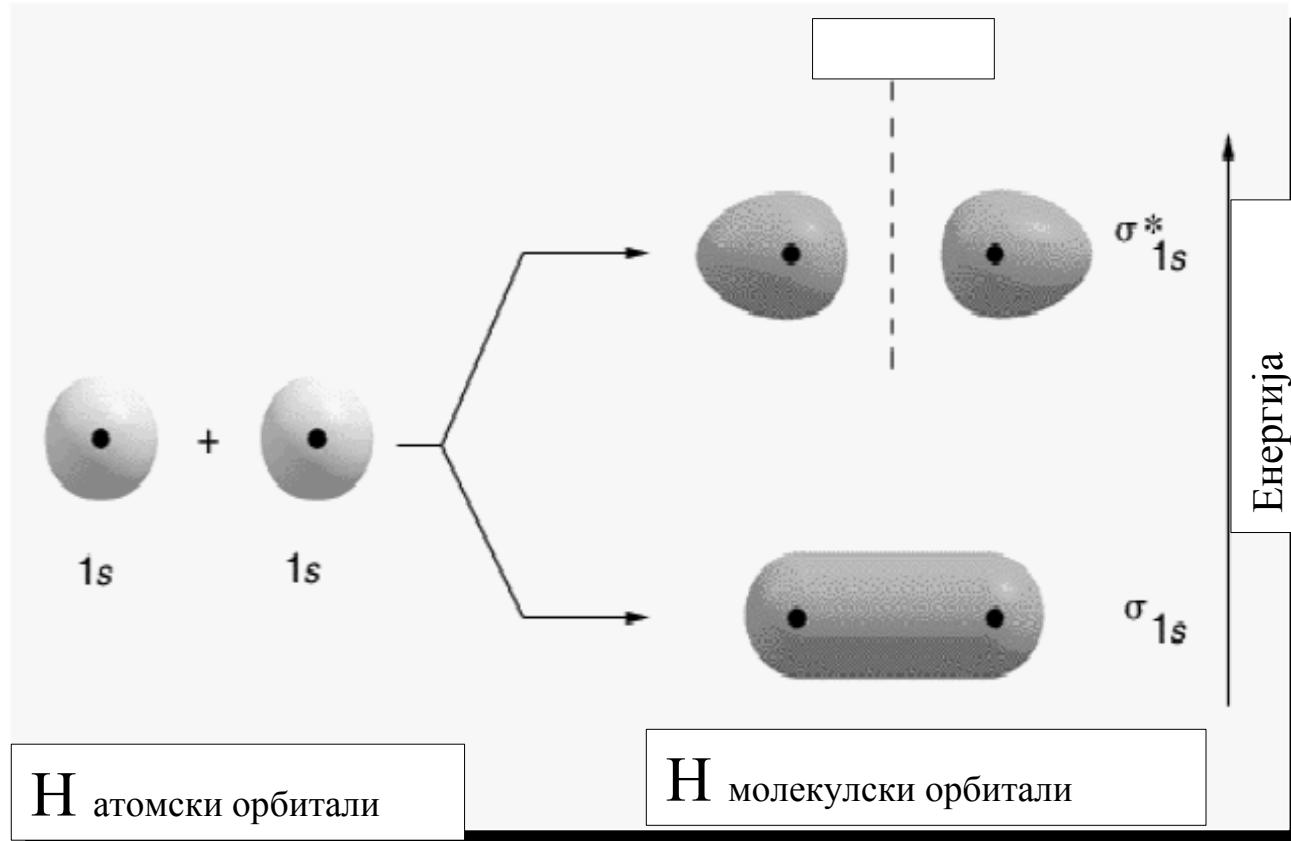


## *LCAO*



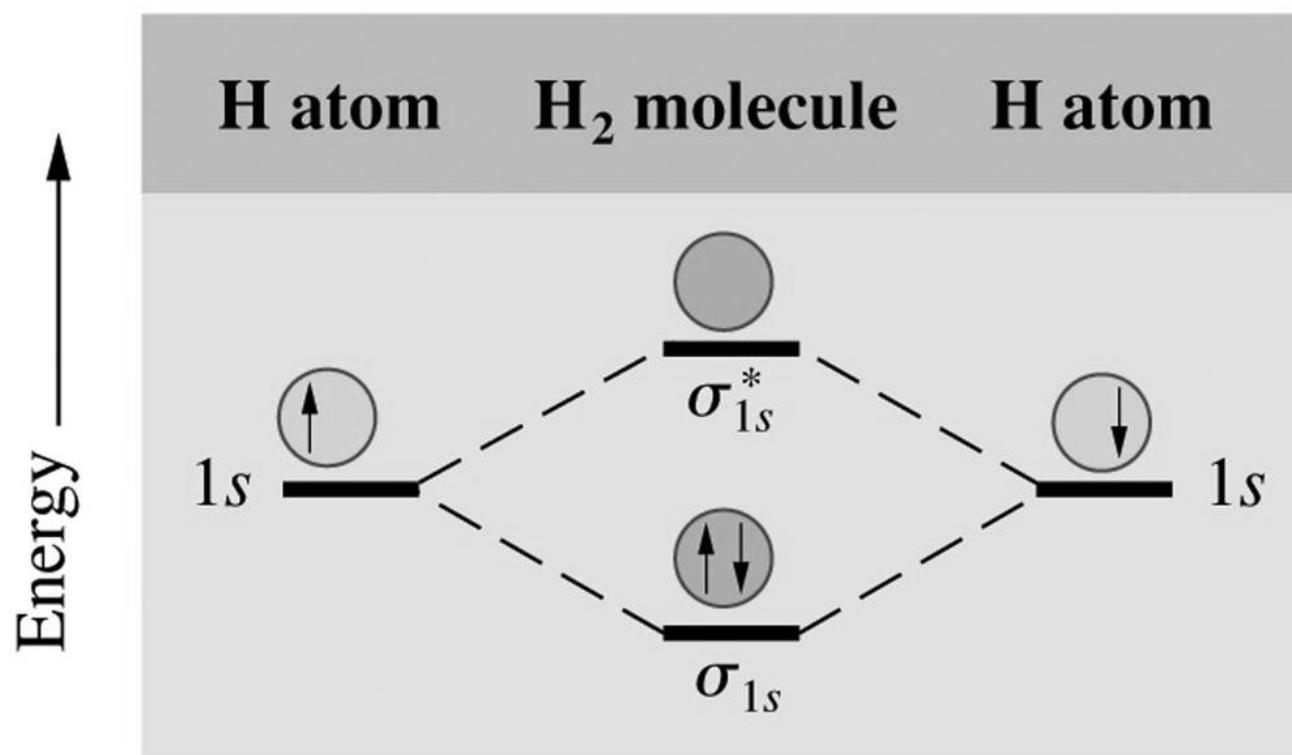
# LCAO за молекулата $H_2$

Водородниот атом има само 1 електрон. Два такви атоми образуваат една сврзувачка ( $\sigma$ ) и една антисврзувачка орбитала ( $\sigma^*$ ) :

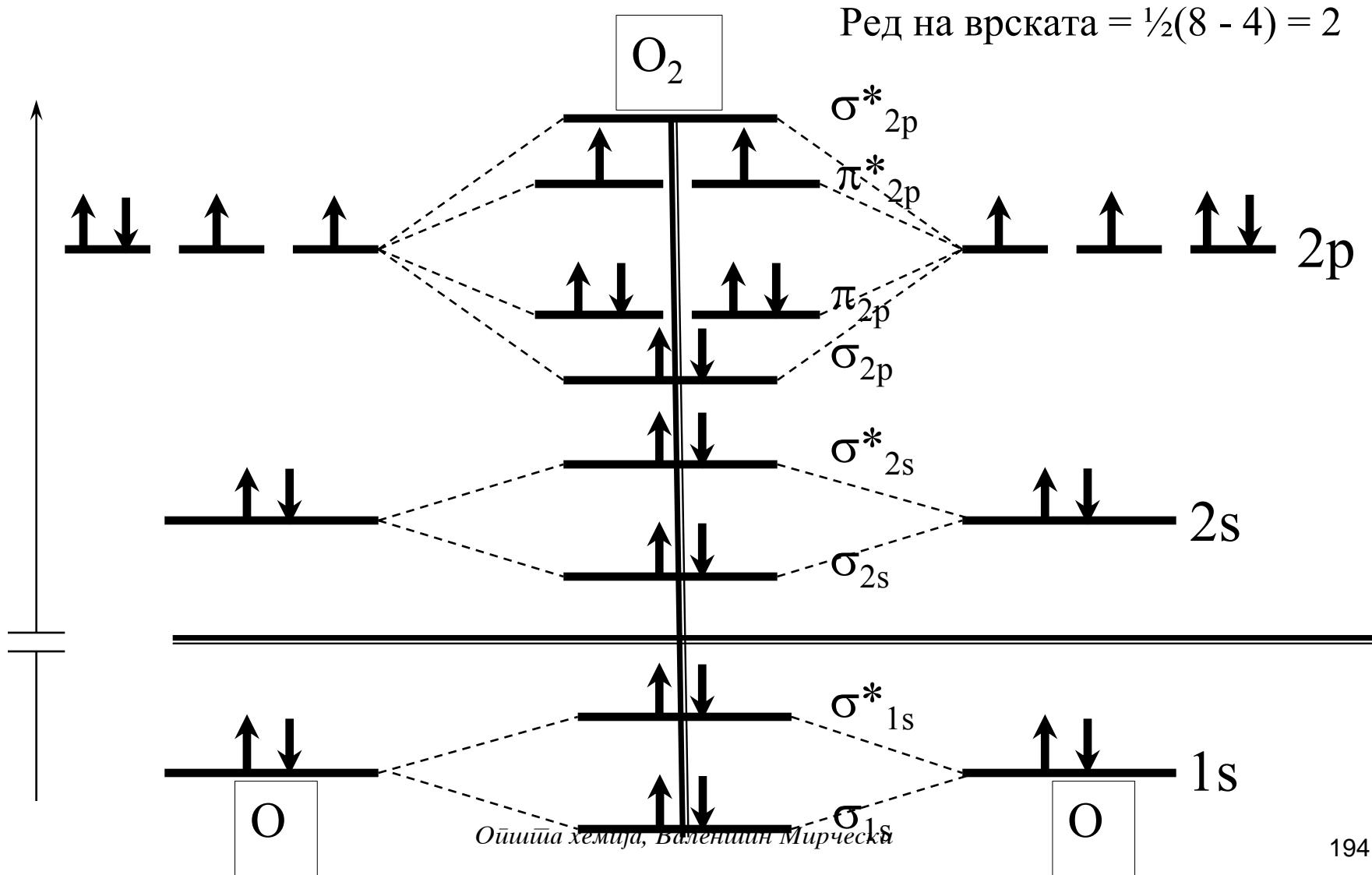


## *LCAO дијаграм за $H_2$*

Водородниот атом има само 1 електрон. Два такви атоми образуваат една сврзувачка ( $\sigma$ ) и една антисврзувачка орбитала ( $\sigma^*$ ) :

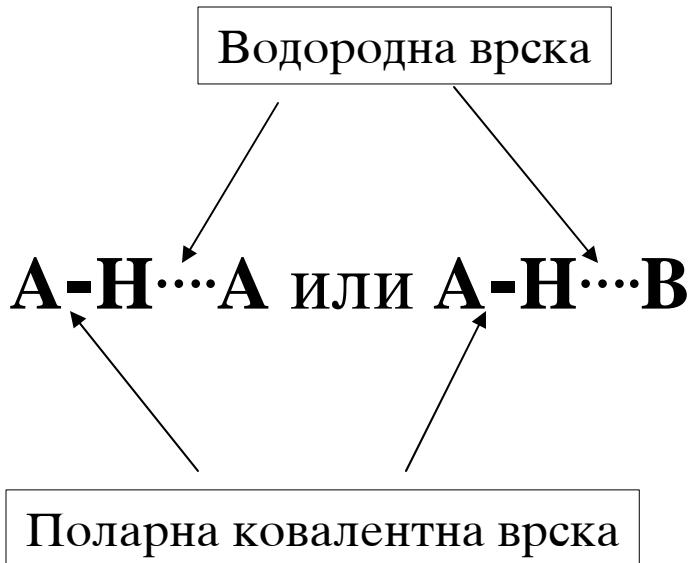


## Дијаграм на Молекулски орбитали (пример: молекулата на $O_2$ )



## **XI. 3 Водородна врска**

Водородната врска е специјален вид на дипол-дипол интеракција. Таа интеракција се воспоставува помеѓу водороден атом, што учествува во образување на поларна ковалента врска (најчесто O-H, N-H, F-H) со електронегативен атом од некоја соседна молекула (тој атом, повторно е O, N, F).



Шематски приказ на водородна врска

каде што А и В се O, N, F итн.

**Внимание:** Водородната врска се формира помеѓу водородниот атом од една молекула и електронегативниот атом од друга молекула.

- Јачината на водородната врска е помала отколку јачината на ковалентната врска, но сепак, водородната врска може во просек да има значителна јачина која што може да изнесува и до 40 kJ/mol. Водородната врска игра исклучително важна улога кај голем број супстанци.

- Супстанците кај кои постојат водородни врски најчесто имаат повисока точка на вриење отколку што се очекува врз основа на нивната релатива молекулска маса.

Точката на вриење расте со порастот на молекулската маса на супстанците. Така на пример, точката на вриење во серијата  $\text{H}_2\text{S}$ ,  $\text{H}_2\text{Se}$  и  $\text{H}_2\text{Te}$  расте со порастот на молекулската маса. Ако водата ја вклучиме во оваа група, тогаш таа би требало да има најниска точка на вриење. Но, заради постоењето на силни водородни врски, водата има највисока точка на вриење од сите спомнати супстанци.

Јачината на водородната врска е определена од степенот на електростатски интеракции помеѓу слободниот електронски пар на електронегативниот елемент (O, N или F) и протонот од соседната молекула.