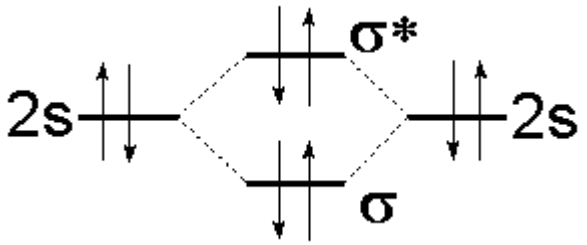
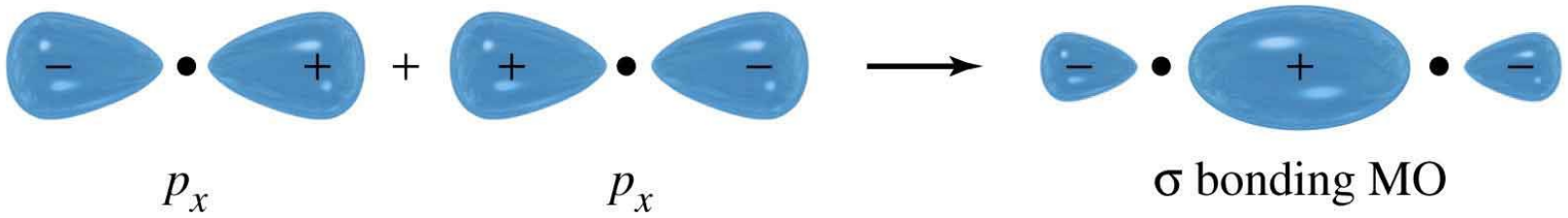
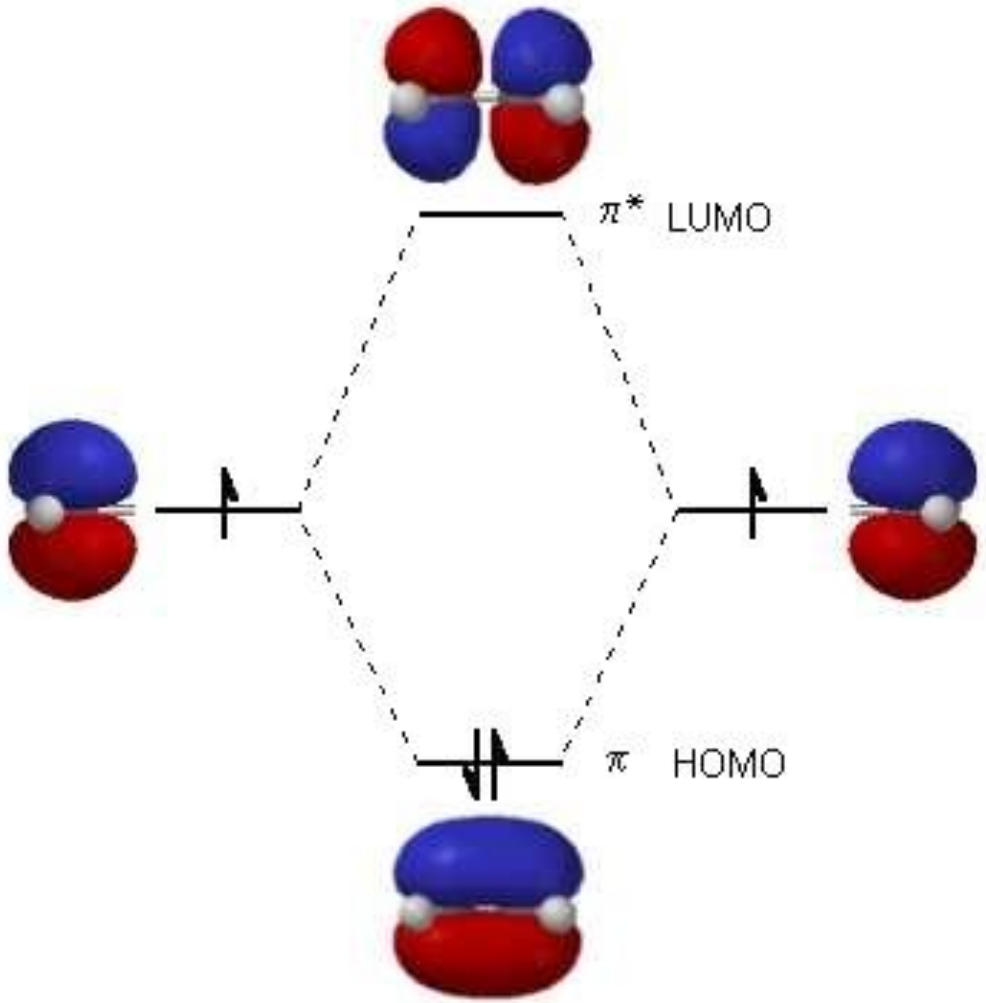
نظريه اوربيتال مولكولي:

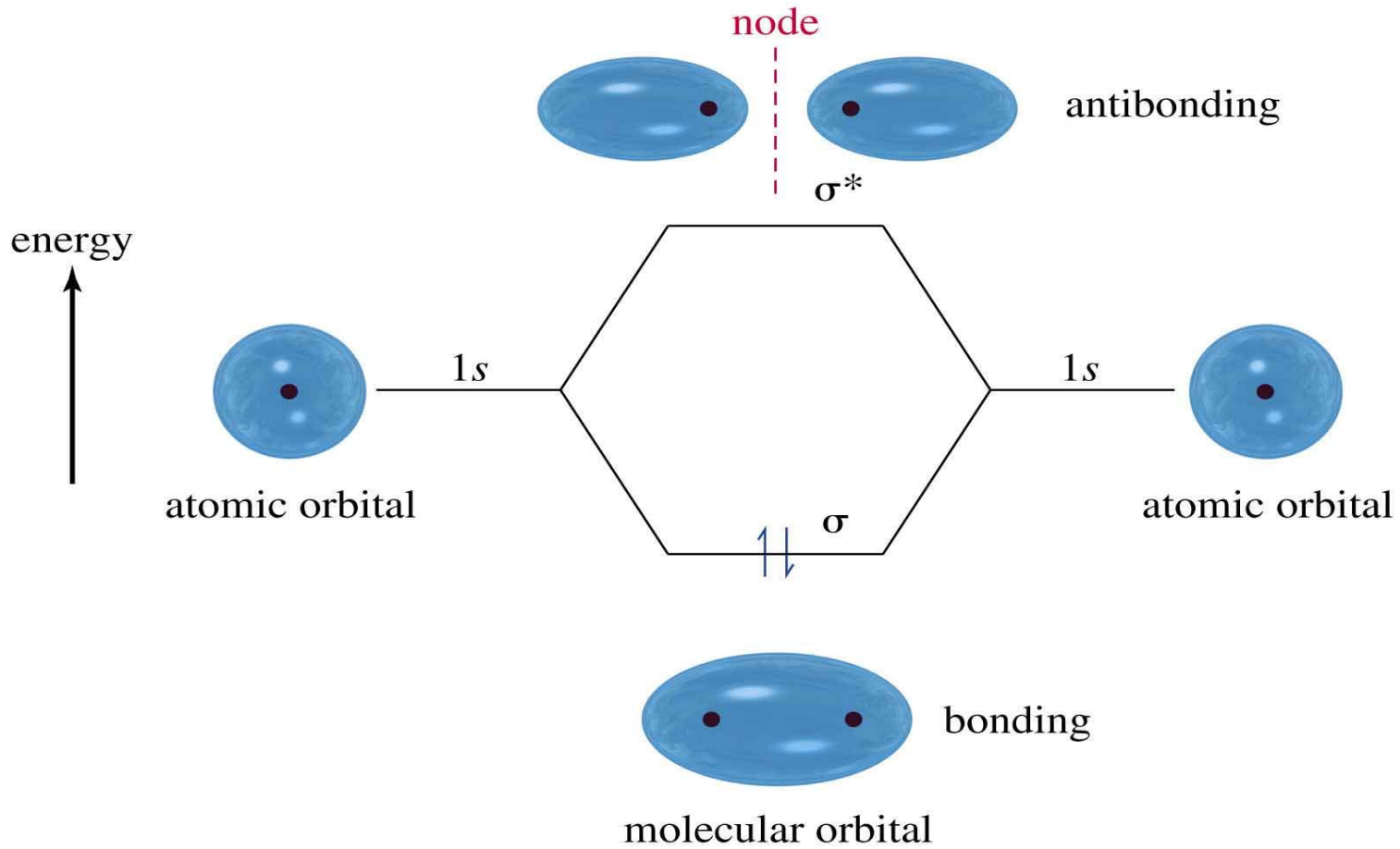
از همپوشاني اوربيتالهاي اتمي , اوربيتالهاي مولكولي به وجود مي آيد اين اوربيتالها وضعيت الكترونها را در يك محيط مولكولي كه تحت تاثير بيش از يك هسته هستند , توصيف مي كنند.



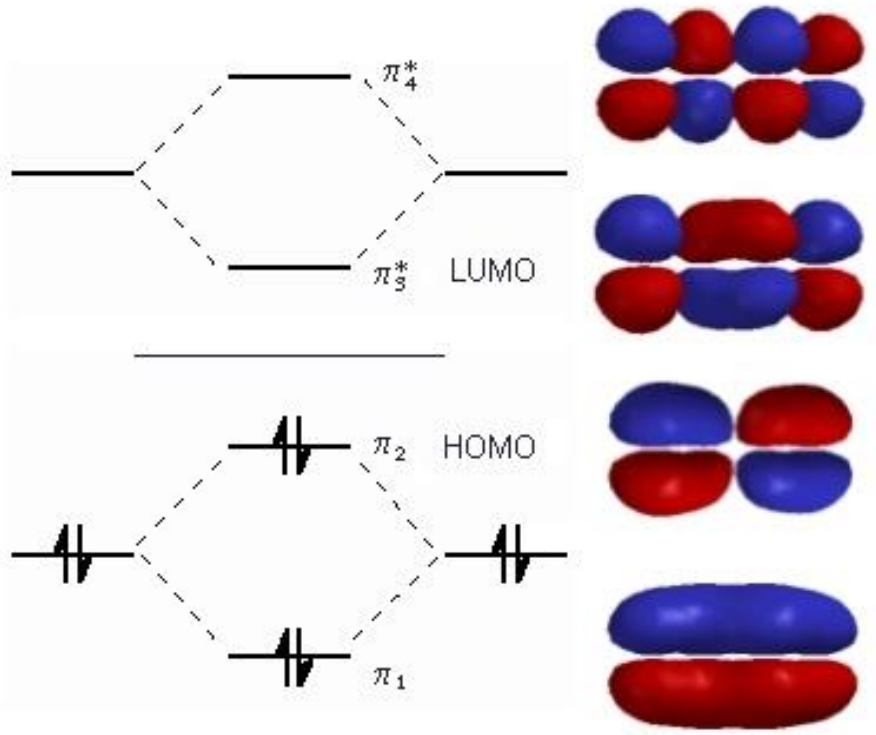
همپوشانی اوربیتال های p



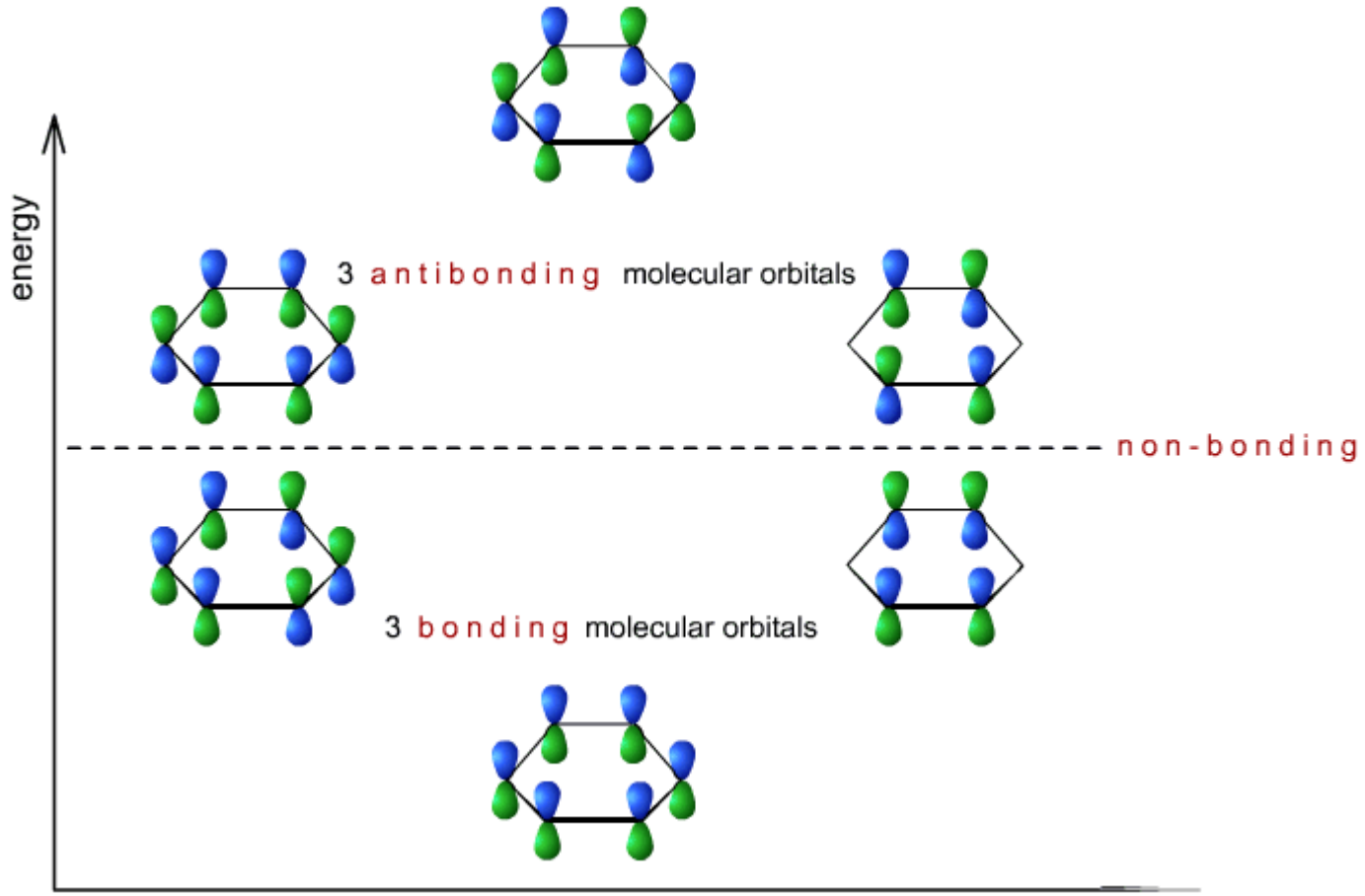

π* LUMO
π HOMO


node
antibonding
σ*
energy
1s
1s
atomic orbital
atomic orbital
σ
bonding
molecular orbital

ترازهاي انرژي بوتادي ان :



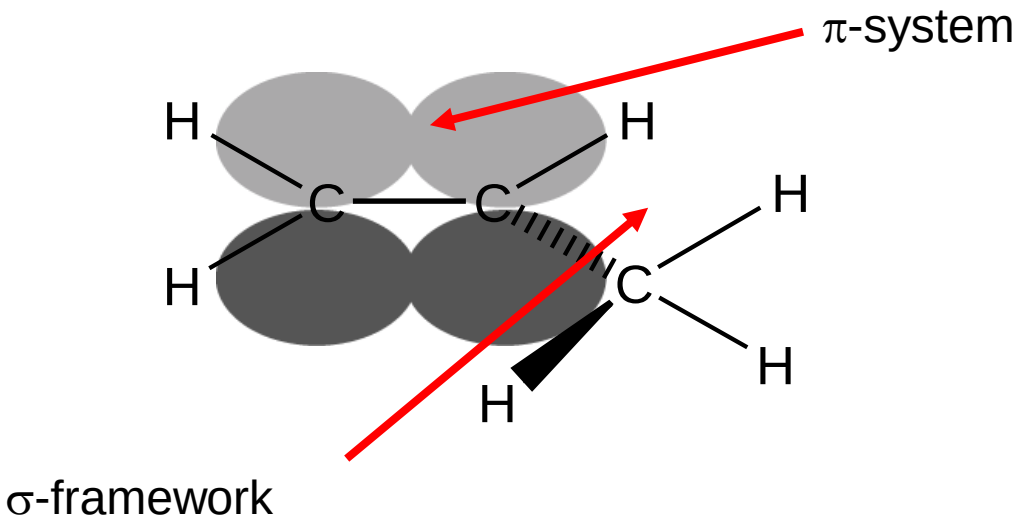
سیستم بنزن:


energy
3 antibonding molecular orbitals
non-bonding
3 bonding molecular orbitals

نظريه اربيتال مولكولي هوكل :

Hückel Molecular Orbital Theory

نظريه اوربيتال مولكولي هوكل (HMO) در سال ۱۹۳۱ عرضه شد و كاربرد آن به همراه نظريه پيوند ظرفيتي عامل اصلي استفاده از نظريه كوانتوم به عنوان ابزار در مطالعه شيمي آلي بوده است.



Erich Hückel (1896-1980)

معادلات عام براي سيستم هاي ٢ اتمي :

$$H_{ij} = \int \Phi_i H \Phi_j d\tau$$

$$S_{ij} = \int \Phi_i \Phi_j d\tau$$

$$\sum_J a_j \left(H_{ij} - E S_{ij} \right) = 0$$

$$ij = 1,2,.....n$$

روش هوكل :

به جاي حل دترمينان عام و انتگرالهاي H_{ij}, S_{ij} انتگرالها به صورت پارامتر در نظر گرفته مي شوند.

۱. $H_{ij} = \alpha$

۲. اگر i, j بهم متصل باشند $H_{ij} = \beta$ واگر نباشند $H_{ij} = 0$

۳. براي $S_{ii} = 1, i = j$ و براي $S_{ii} = 0, i \neq j$

۴. پيوند هاي سيگما متمركز بوده , مي توان آنها را به عنوان يك چها ر چوب براي الكترونهاي پي در نظر گرفت

محاسبه انرژي براي سيستم هاي ۲ اتمي:

$$\begin{vmatrix} \alpha - \varepsilon & \beta \\ \beta & \alpha - \varepsilon \end{vmatrix} = 0$$

$$(\alpha - \varepsilon)^2 - \beta^2 = 0$$

$$(\alpha - \varepsilon - \beta)(\alpha - \varepsilon + \beta) = 0$$

$$\varepsilon = \alpha \pm \beta$$

This is the energy of an isolated π-bond