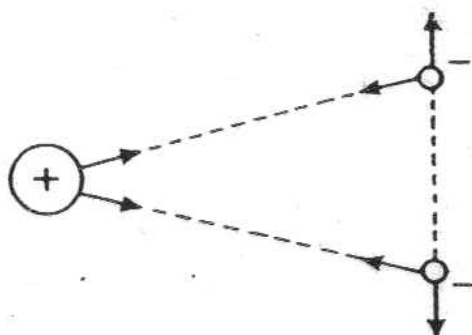


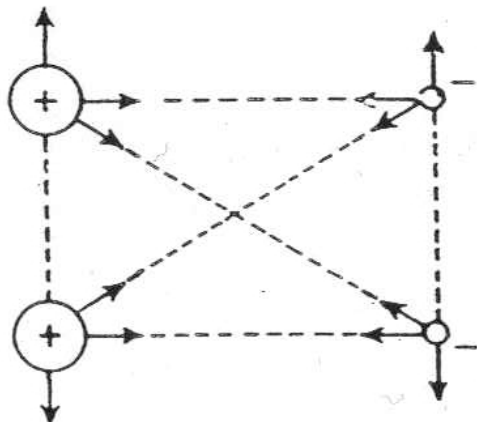
Συνδυασμός δύο  
 στατικών κυμάτων σε χορδή. Το  
 άθροισμα και η διαφορά των  
 στατικών κυμάτων δίνει δύο πιο  
 «εντοπισμένα» κύματα.



άτομο υδρογόνου



άτομο ηλίου



μόριο υδρογόνου

Σχηματική παράσταση των αλληλεπιδράσεων στα άτομα υδρογόνου και ηλίου και στο μόριο υδρογόνου.

-Εξίσωση Schrödinger για το άτομο του Υδρογόνου

$$\left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \Psi = - \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - V) \Psi \quad V = -\frac{e^2}{r}$$

$$-\frac{h^2}{8\pi^2 m} \left\{ \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right\} \Psi + V \Psi = E \Psi$$

$\mathcal{H}$  = Χαμιλιτώνειος ΤΕΛΕΣΤΗΣ

$$= -\frac{h^2}{8\pi^2 m} \left\{ \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right\} + V$$

$$\mathcal{H} \Psi = E \Psi$$

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \Rightarrow \text{ΤΕΛΕΣΤΗΣ Laplace.}$$

Για το ιόν  $\text{H}_2^+$

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \nabla^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0 r_A} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0 r_B} + \frac{1}{4\pi\epsilon_0 R}$$

$\nabla^2$  = ΤΕΛΕΣΤΗΣ Laplace συντεταγμένων ηλεκτρονίου

$r_A$  = απόσταση ηλεκτρονίου από τον πυρήνα A

$r_B$  = απόσταση ηλεκτρονίου από του πυρήνα B

$R$  = απόσταση πυρήνα A - Πυρήνα B

Για το μόριο  $H_2$

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & -\frac{\hbar^2}{2M} (\nabla_A^2 + \nabla_B^2) - \frac{\hbar^2}{2m} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_{1A}} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_{1B}} - \\ & - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_{2A}} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_{2B}} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} + \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 R} \end{aligned}$$

$M$  = μάζα πυρήνα υδρογόνου

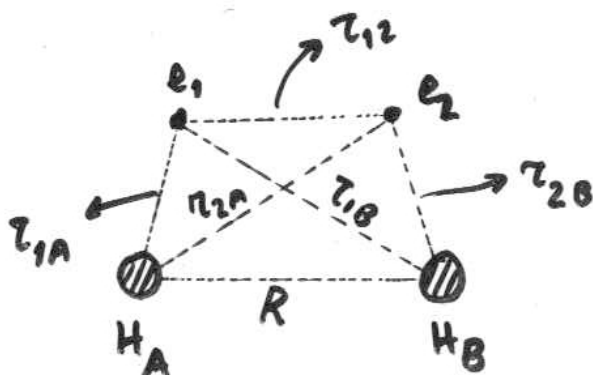
$m$  = μάζα ηλεκτρονίου

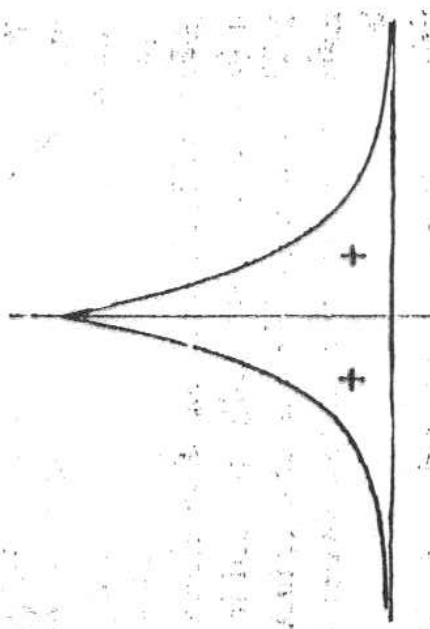
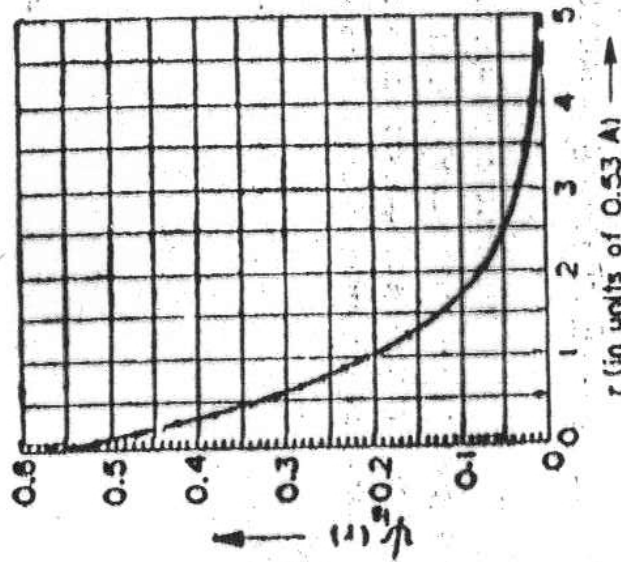
$Z$  = ατομικός αριθμός πυρήνα ( $Z=1$  για το υδρογόνο)

$\nabla_A^2, \nabla_B^2$  = ΤΕΛΕΣΤΕΣ Laplace σχετικοί με τη θέση των πυρήνων  $A, B$

$\nabla_1^2, \nabla_2^2$  = ΤΕΛΕΣΤΕΣ Laplace σχετικοί με τη θέση των ηλεκτρονίων  $1, 2$

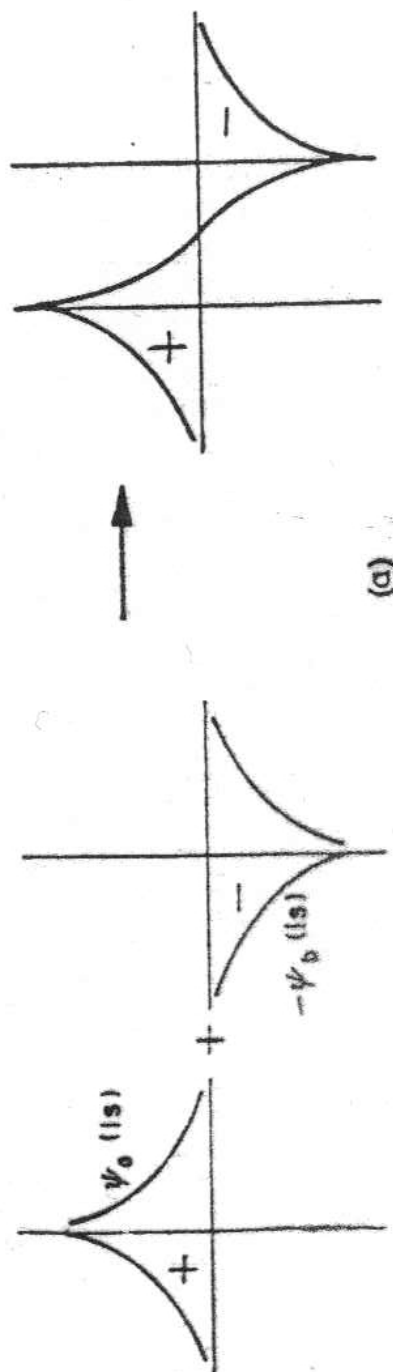
$R$  = απόσταση πυρήνα  $A$  - πυρήνα  $B$



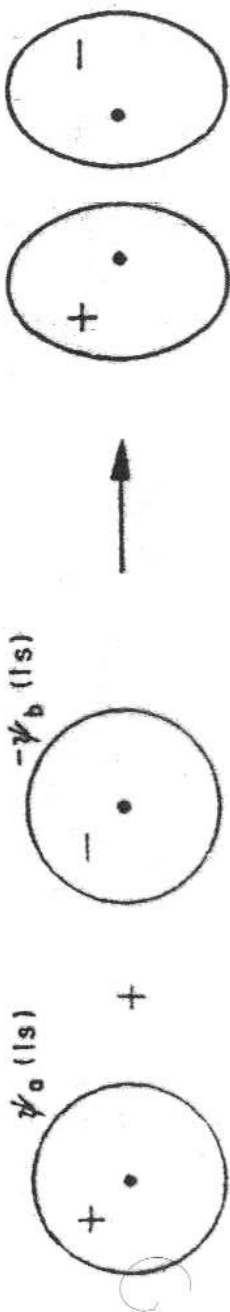


(a)

(b)

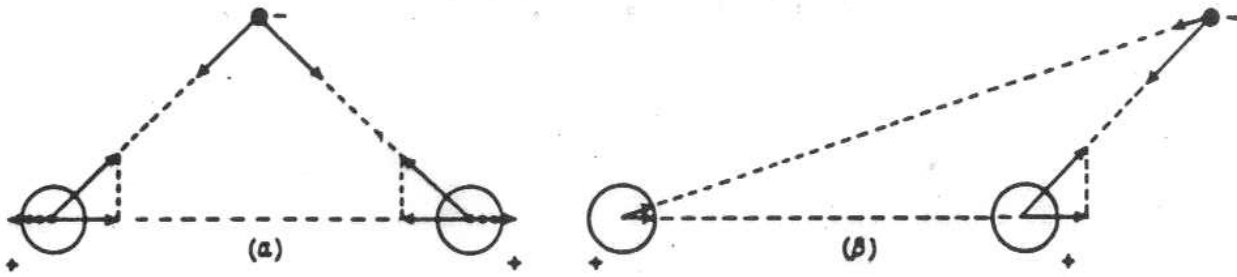


(a)



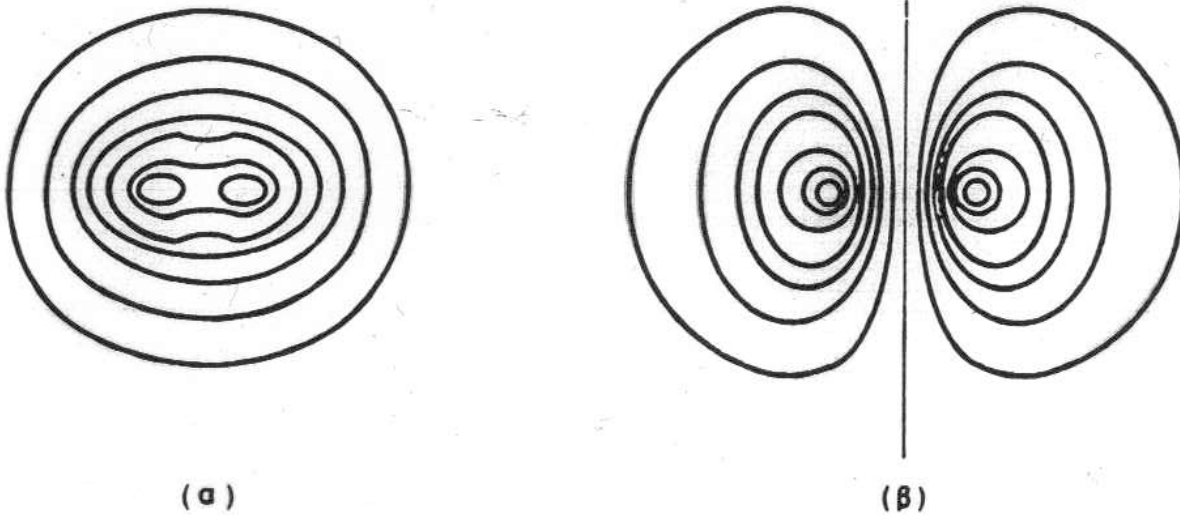
(b)

The approximate molecular orbital for the first excited state obtained by subtracting the two 1s hydrogen atomic orbitals. (a) The radial part of the atomic and the molecular wave functions. The square of the molecular orbital gives the probability distribution which is an approximation to the exact distribution shown in Fig. 4.6(b). The boundary surface representation of the first excited state molecular orbital is shown in (b).

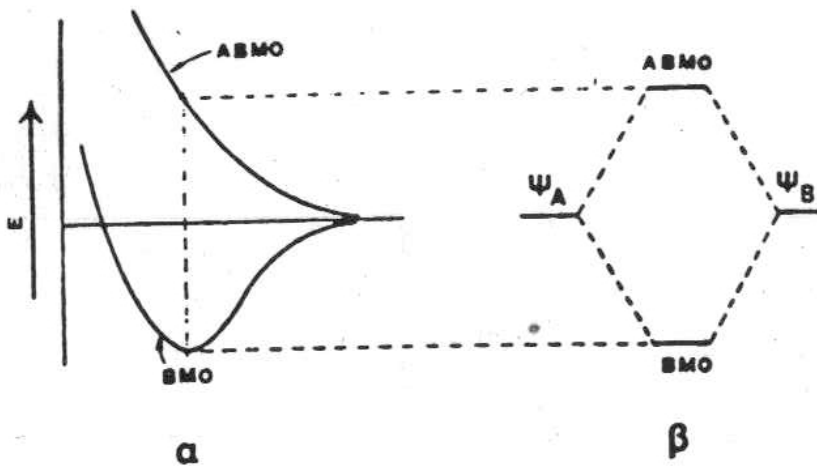


Όταν το ηλεκτρόνιο βρίσκεται στο χώρο μεταξύ των πυρήνων αναπτύσσονται ελκτικές και όταν βρίσκεται εκτός απωθητικές δυνάμεις. Τα βέλη που έχουν σχεδιασθεί με στιγμές στο σχήμα (α) παριστάνουν τις δυνάμεις απώσεως μεταξύ των δύο θετικών φορτίων. Ανάλογες δυνάμεις υπάρχουν στην περίπτωση (β) δεν έχουν όμως σχεδιασθεί.

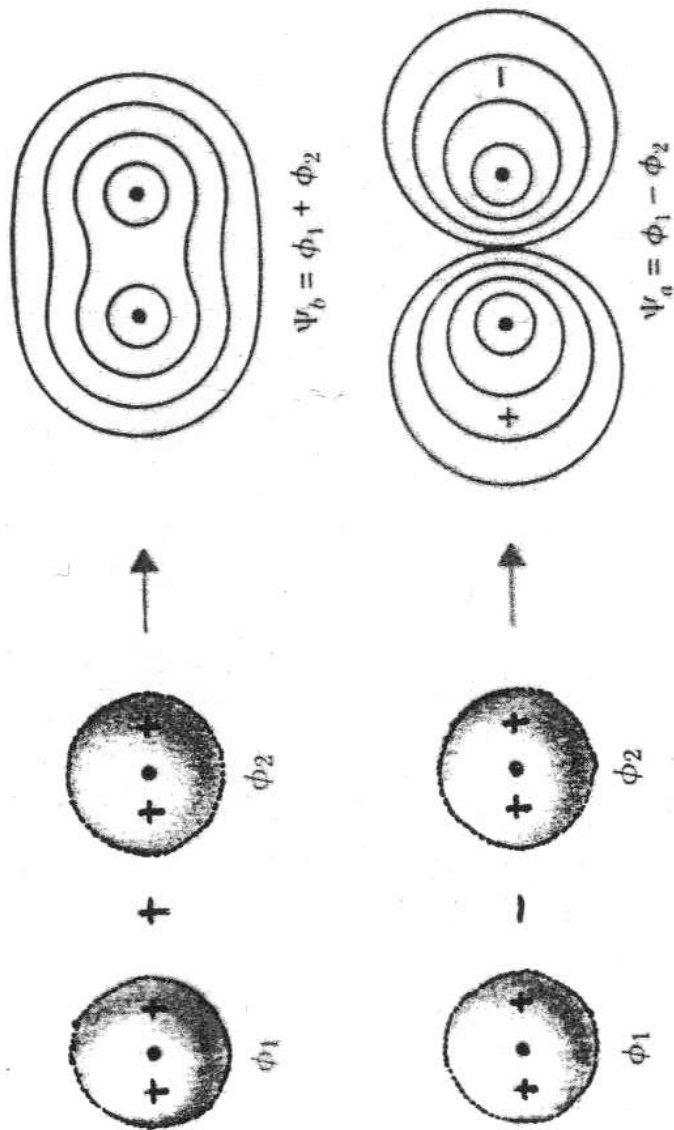
Κομβική Επιφάνεια



Ισόπυκνες για το  $H_2^+$  (α) δεσμικό (β) αντιδεσμικό τροχιακό.



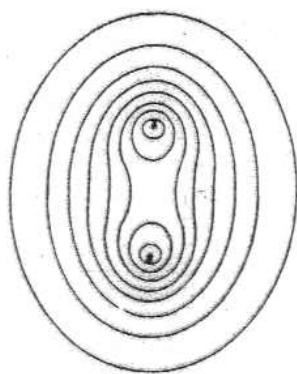
Μεταβολή της δυναμικής ενέργειας των δεσμικών και αντιδεσμικών μοριακών τροχιακών με την απόσταση των πυρήνων (α). Ένέργεια αντιδεσμικού και δεσμικού μοριακού τροχιακού σχετικά με την ενέργεια των ατομικών τροχιακών των ατόμων Α και Β (β)



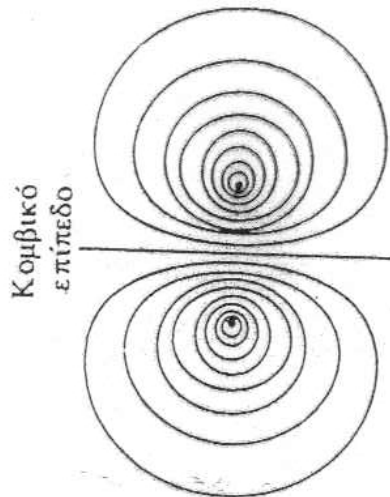
The 1s orbitals,  $\phi_1$  and  $\phi_2$ , on two hydrogen or helium atoms may combine to form either a bonding MO,  $\psi_b$ , or an antibonding MO,  $\psi_a$ . The sign of  $\psi_b$  is everywhere positive. The sign of  $\psi_a$  changes between the nuclei; a nodal plane exists here because the value of  $\psi_a$  is zero at the midpoint between the atoms.



Τα μοριακά τροχιακά είναι κυματοσυναρτήσεις για τα ηλεκτρόνια των μορίων, όπως είναι τα ατομικά τροχιακά για τα άτομα. Οι κυματοσυναρτήσεις αυτές είναι γενικά πιο πολύπλοκες απ' ό τι τα ατομικά τροχιακά, αφού περισσότεροι από έναν πυρήνα συνεισφέρουν στο ελκτικό μέρος του δυναμικού.



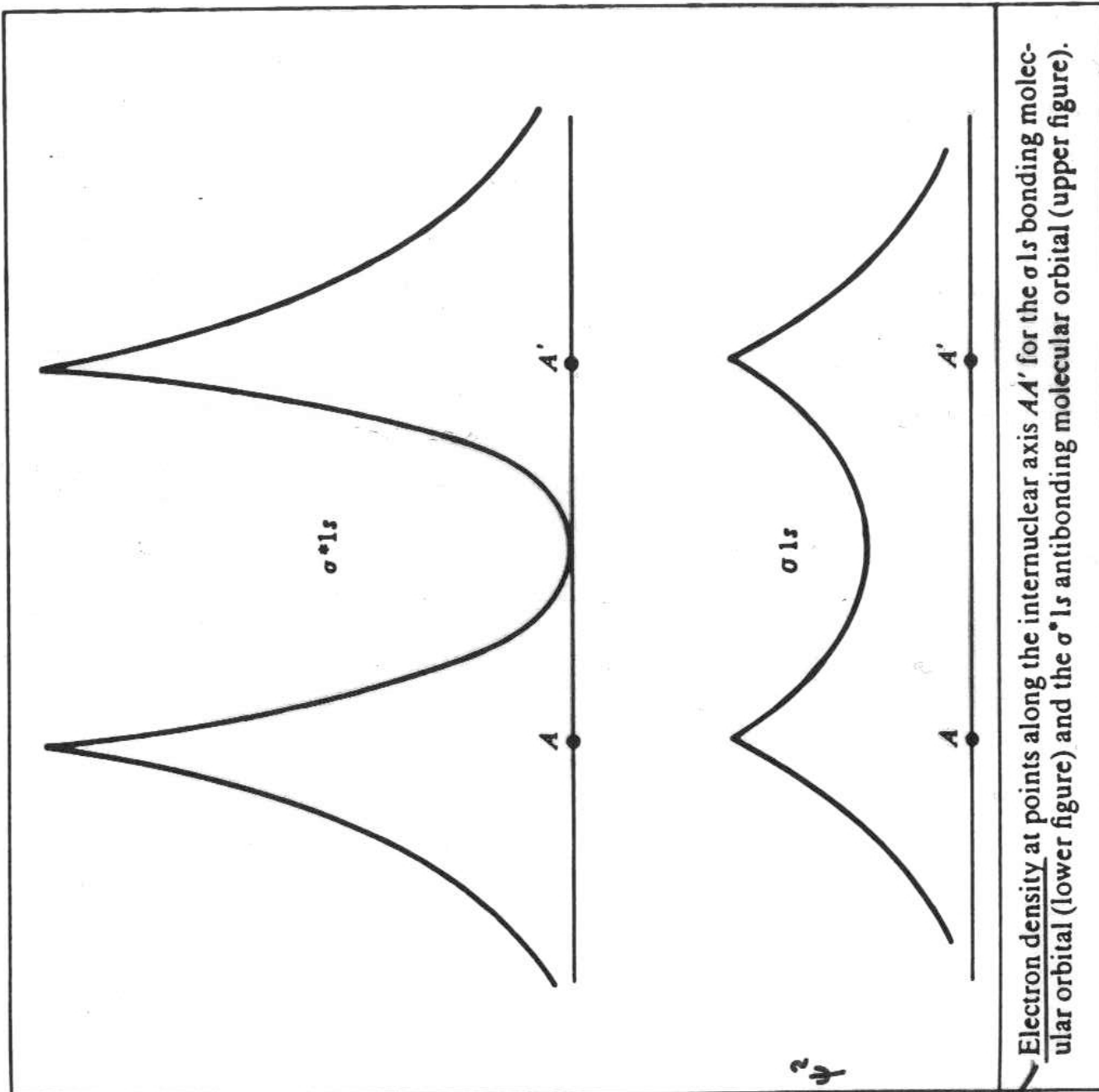
Περιγράμματα ηλεκτρονιακής πυκνότητας (ισόπυκνες καμπύλες) για το δεσμικό μοριακό τροχιακό του ιόντος  $H_2^+$ .



Περιγράμματα ηλεκτρονιακής πυκνότητας (ισόπυκνες καμπύλες) για το αντιδεσμικό μοριακό τροχιακό του ιόντος  $H_2^+$ .

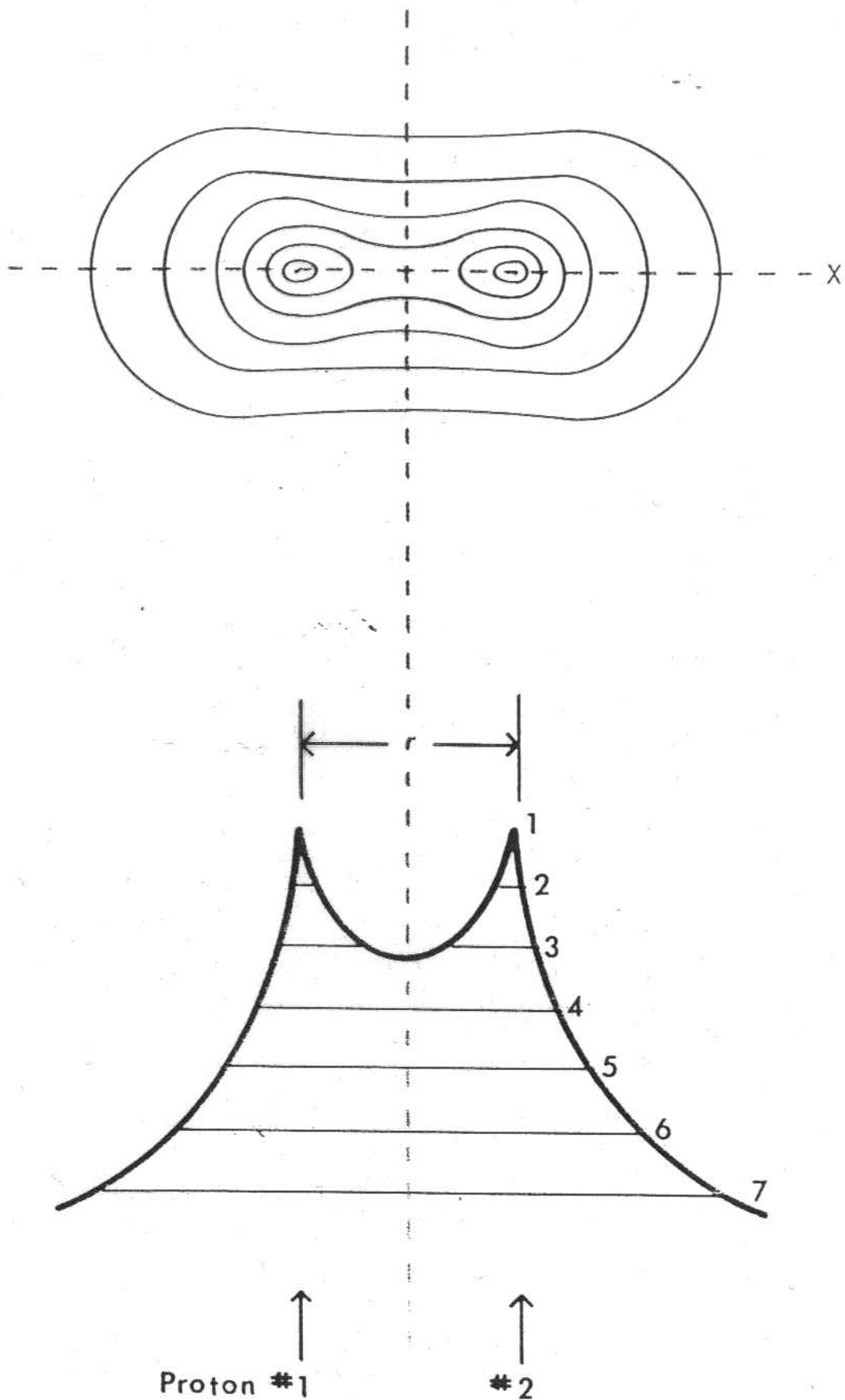
Στο  $\Psi_+$  οι κυματοσυναρτήσεις που συνιστούν το μόριο ενισχύουν ή μια την άλλη στη περιοχή των πυρήνων.

Στο  $\Psi_-$  οι κυματοσυναρτήσεις που συνιστούν το μόριο εξουδετερώνονται, σχηματίζοντας μια κομβική επιφάνεια μεταξύ των πυρήνων.

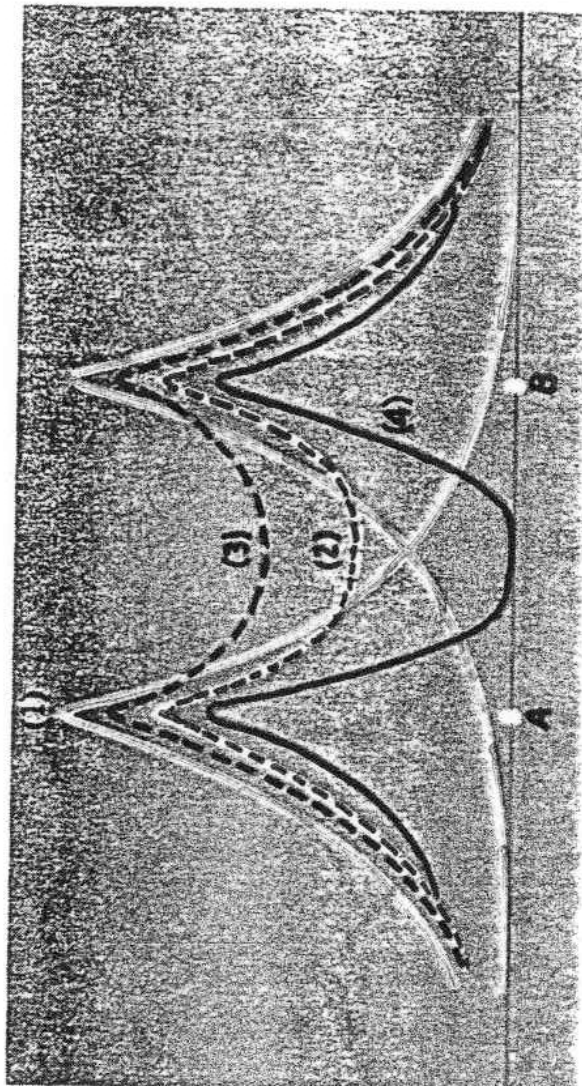


ηλεκτρονική πυκνότητα  $\psi^2$

Electron density at points along the internuclear axis AA' for the  $\sigma_{1s}$  bonding molecular orbital (lower figure) and the  $\sigma^*_{1s}$  antibonding molecular orbital (upper figure).



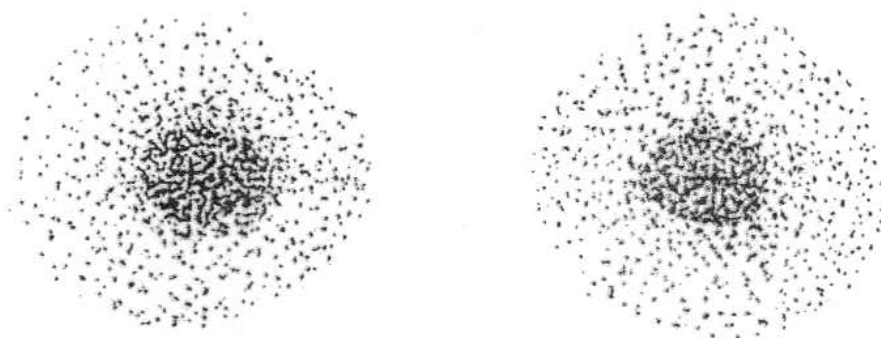
*Schematic representation of electron probability contours in the hydrogen molecule. Electronic charge density decreases in the order  $1 > 2 \dots > 7$ . Bond length =  $r$ . Internuclear axis =  $x$ . Above: plane of symmetry through molecule = cross section. Below: plot of electron density against distance along  $x$ .*



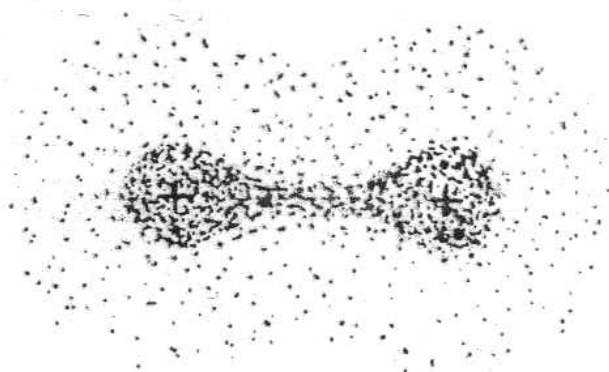
Electron density distributions for the one-electron  $H_2^+$  ion, with  $H_A$  at point A and  $H_B$  at point B. **(1)** The solid white curve represents for each atom separately either  $\phi_A^2$  or  $\phi_B^2$ . **(2)** The broken white curve represents the simple sum  $(\phi_A^2 + \phi_B^2)/2$ . **(3)** The broken black curve represents the bonding function  $(\phi_A + \phi_B)^2/\sqrt{2}$ . **(4)** The solid black curve represents the antibonding function  $(\phi_A - \phi_B)^2/\sqrt{2}$ .



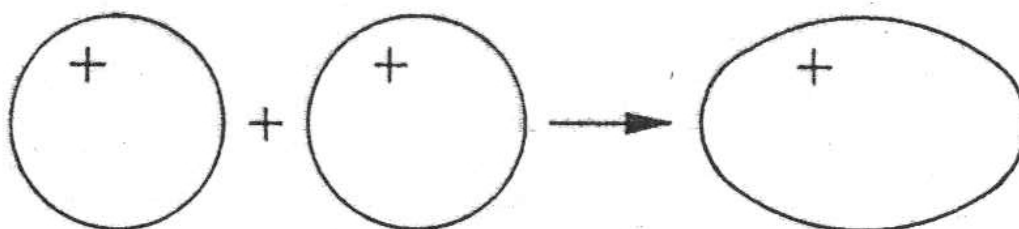
(a)



(b)



(c)



Two s atomic orbitals

Molecular orbital

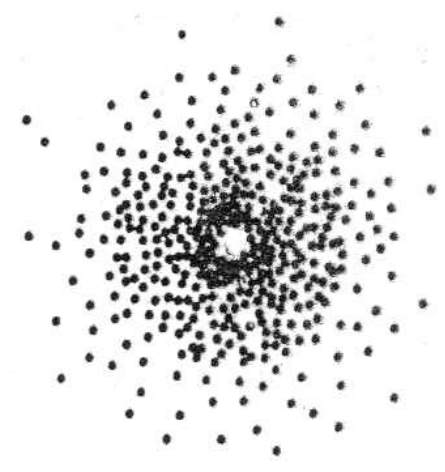
(d)

The formation of the ground state molecular orbital of  $\text{H}_2^+$  from the two  $1s$  atomic orbitals of the hydrogen atom. (a) The atomic orbitals are shown when the nuclei are far away. (b) The atomic orbitals begin to distort as the nuclei approach each other close enough for significant interaction. (c) The atomic orbitals have lost their identity in the resulting molecular orbital. (d) The boundary surface representation of the molecular orbital and the component atomic orbitals.

Superimposed imaginary  
photographs of an electron in  $H_2^+$ .

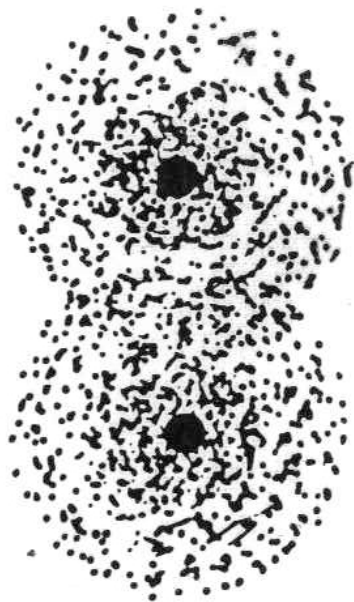


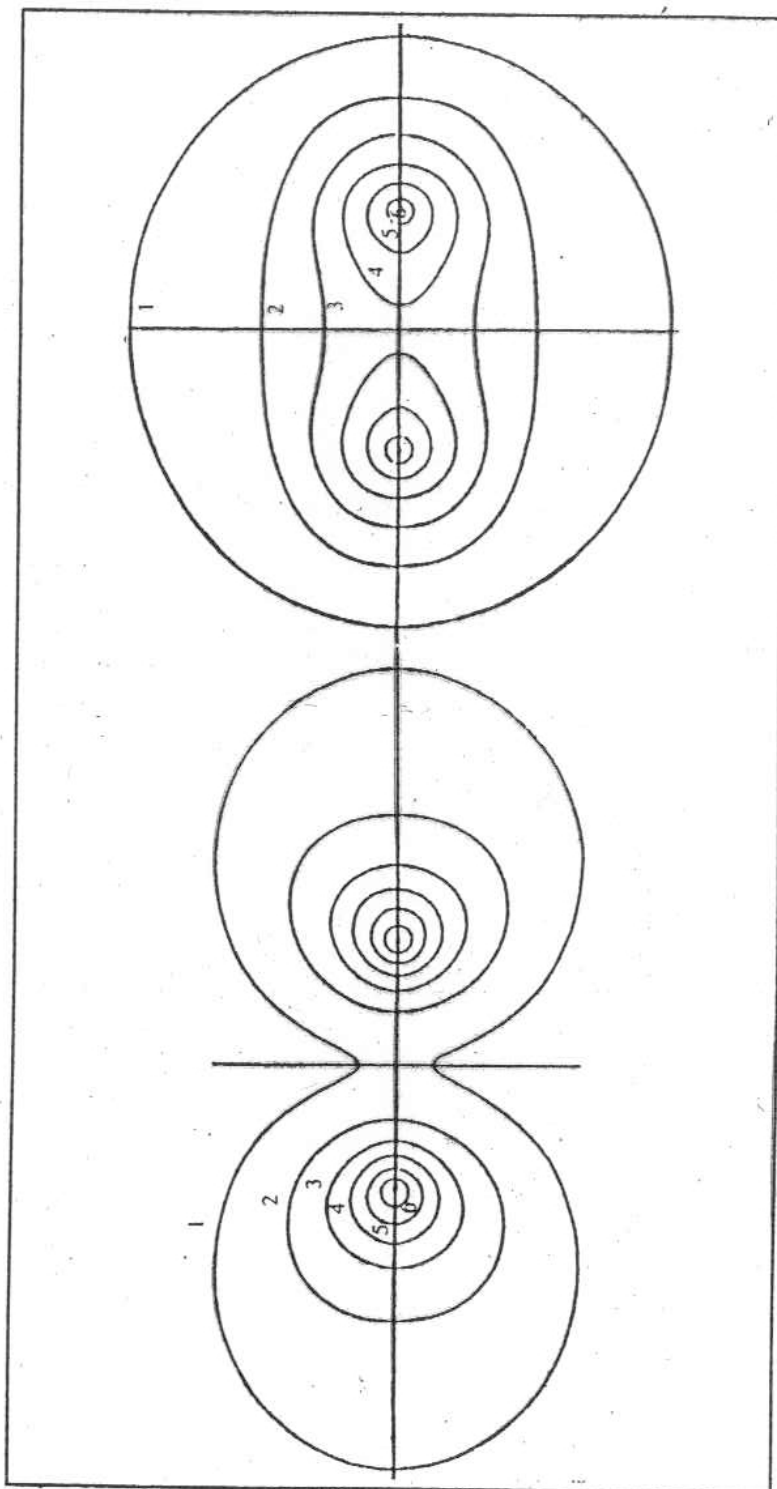
Superimposed imaginary  
photographs of an electron in a  
hydrogen atom.





Εικονική παράσταση  
του μορίου υδρογόνου.

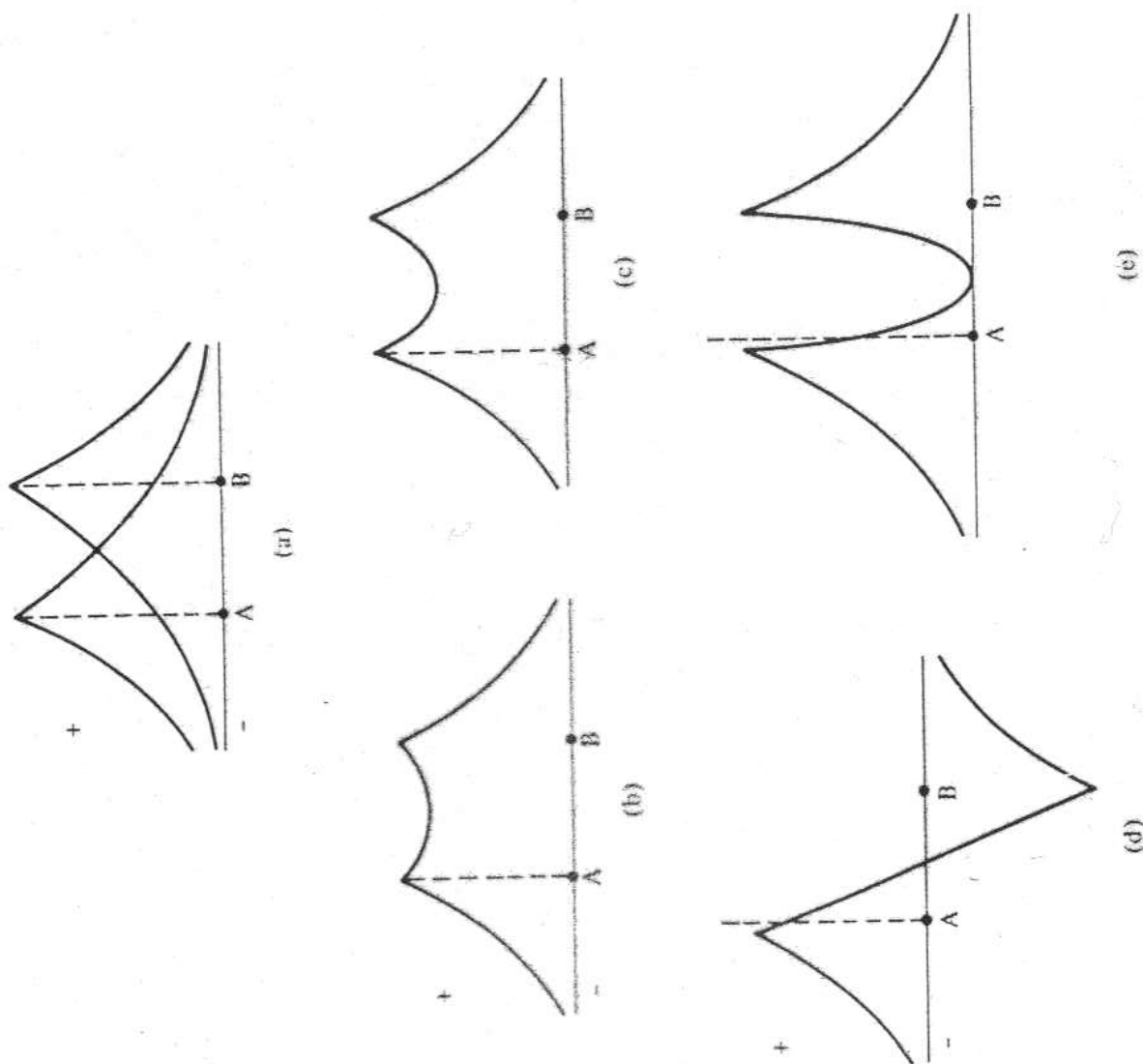




(a) ασταθής κατάσταση  
(παράλληλα spin, άπωση)

(b) σταθερή κατάσταση  
(αντιπαράλληλα spin, έλξη)

Διάγραμμα ισοπύκνων τής ηλεκτρονικής πυκνότητας στο μόριο  $H_2$  σύμφωνα με τους υπολογισμούς του London



(a)  $\psi_A$  and  $\psi_B$  for individual hydrogen atoms  
 (b)  $\psi_b = \psi_A + \psi_B$ . (c) Probability function for the bonding orbital,  $\psi_b^2$ . (d)  $\psi_a = \psi_A - \psi_B$ . (e) Probability function for the antibonding orbital,  $\psi_a^2$ . Note that the bonding orbital increases the electron density between the nuclei (c) but that the antibonding orbital decreases the electron density between the nuclei (e). [Adapted from H. H. Jaffé, in "Comprehensive Biochemistry," M. Florkin and E. H. Stotz, Eds., Elsevier, Amsterdam, 1961. Reproduced with permission.]

$$\Psi_+ = \Psi_A + \Psi_B$$

ΔΕΣΜΙΚΟ  
ΜΟΡΙΑΚΟ ΤΡΟΧΙΑΚΟ

$$\Psi_- = \Psi_A - \Psi_B$$

ΑΝΤΙ-ΔΕΣΜΙΚΟ  
ΜΟΡΙΑΚΟ ΤΡΟΧΙΑΚΟ

Κατανομή ηλεκτρονικής πυκνότητας  $\Psi^2$

$$\Psi_+^2 = \Psi_A^2 + 2\Psi_A\Psi_B + \Psi_B^2$$

$$\int \Psi_+^2 = \int \Psi_A^2 + 2 \int \Psi_A\Psi_B + \int \Psi_B^2$$

↓ ΚΑΝΟΝΙΚΟΠΟΙΗΜΕΝΗ.

$$\int \Psi_+^2 d\tau = 1$$