

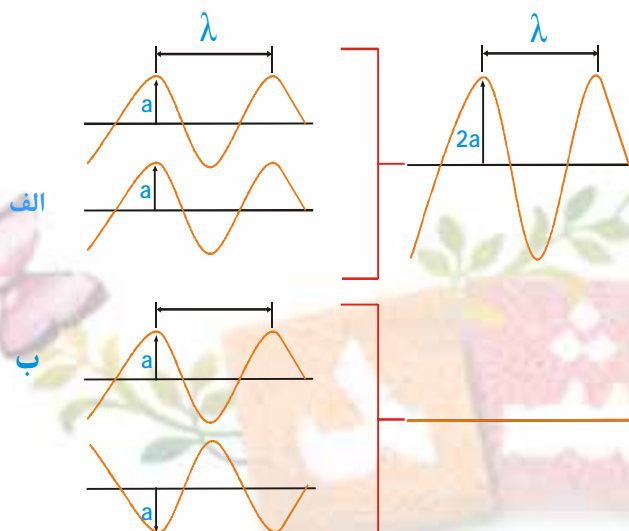
## تداخل سازنده و مخرب امواج

تاکنون نظریه‌هایی برای ساختار مولکولی مورد بحث قرار گرفتند که نحوه تشکیل پیوند را بر پایه اوربیتالهای اتمی مورد بحث قرار می‌دادند. روش اوربیتالهای مولکولی، دیدگاهی متفاوت است. در این دیدگاه، اوربیتالها در ارتباط با کل مولکول در نظر گرفته می‌شوند. ساختار الکترونی مولکول را با افزودن الکترون به این اوربیتالهای مولکولی، طبق یک نظم مناسب بناگذاری، بدست می‌آورند. همانگونه که نشان دادن اوربیتالهای اتمی با حروف  $p, s$  و... مرسوم است، اوربیتالهای مولکولی نیز با حروف یونانی  $S$  (سیگما)،  $p$  (پی) و غیره نشانه‌گذاری می‌شوند.

اگر دو موج همفاز که طول موج ( $\lambda$ ) و دامنه ( $a$ ) یکسان دارند با یکدیگر ترکیب شوند، یکدیگر را تقویت می‌کنند (شکل الف). در موج حاصل، طول موج تغییر نمی‌کند، اما دامنه آن  $a + a = 2a$  است.

اگر دو موج کاملاً «ناهمفاز» باشند، یکدیگر را حذف می‌کنند (شکل ب) و دامنه موج حاصل برابر

$$a + (-a) = 0$$



شکل (الف) تقویت امواج همفاز (ب) حذف امواج ناهمفاز

می توان تصور کرد که اوربیتالهای مولکولی  $H_2$ ، از همپوشانی دو اوربیتال  $1s$  از دو اتم هیدروژن حاصل شوند. اگر همپوشانی به تقویت موج بیانجامد (ترکیب افزایشی)، چگالی الکترونی در ناحیه بین دو هسته زیاد خواهد بود. جاذبه دو هسته نسبت به این بار الکترونی اضافی، مولکول را به هم نگه می دارد. اوربیتال مولکولی حاصل اوربیتال پیوندی سیگما نامیده می شود و با نماد  $S$  نشان داده می شود. چون دو اوربیتال اتمی با یکدیگر ترکیب شده اند، باید دو اوربیتال مولکولی بدست آید. اوربیتال مولکولی دیگر، حاصل از ترکیب «ناهمفاز» امواج (ترکیب کاهششی) است. در این حالت چگالی الکترونی در ناحیه بین دو هسته خیلی کم است. چون دو هسته مثبت یکدیگر را دفع می کنند و در فاصله بین آنها چگالی کم الکترونی قادر به جبران این دافعه با ایجاد جاذبه ای قوی نیست، لذا نزدیک نگهداشتن دو هسته در این حالت نیازمند انرژی است. این اوربیتال مولکولی را اوربیتال ضد پیوندی سیگما (با نشانه  $S^*$ ) می نامند، چون نه تنها در به هم نگهداشتن دو اتم کمک نمی کند بلکه عمل آن در جهت دور کردن دو اتم از یکدیگر است. اوربیتالهای سیگما ( $S$  و  $S^*$  هر دو)، به دور محوری که دو هسته را به یکدیگر متصل می کند، تقارن استوانه ای دارند و چرخش مولکول به دور این محور، تغییر قابل مشاهده ای در شکل اوربیتال بوجود نمی آورد.

