

Kémiai kötés: az elektronfelhő jelbeszéde

Chemical Bond: The Sign-Language of Electron Density Cloud

MEZEY Pál Géza¹

Memorial University of Newfoundland, Department of Chemistry,
St. John's, NL, Canada
paul.mezey@gmail.com

ABSTRACT

There is nothing else in a molecule than atomic nuclei and an electron density cloud, and this cloud is what holds the molecule together, this cloud makes chemical bonding. There is no physically existing material like some imagined “line of chemical bond” inside a molecule, this simplistic model is inherited from pre-quantum chemistry times. The sign language of electron density clouds tells it all, if one pays attention to the details of molecular shape. A Molecular Isodensity Contour, MIDCO(d) is a closed surface along which the electron density is same constant d . If d is large enough, then *every polyatomic molecule must contain at least two separate such contours*, MIDCO₁(d) and MIDCO₂(d), implying that *the molecular parts enclosed by them are not bonded at this density level d* . However, for a low enough d' value, there must exist a larger size MIDCO(d') containing both MIDCO₁(d) and MIDCO₂(d), of the higher density value d . Consequently, the molecular parts enclosed by MIDCO₁(d) and MIDCO₂(d), are actually “bonded” in the molecule at the lower level d' of the electron density.

Keywords: electron density cloud, isocontours, bonding between molecular fragments

ÖSSZEFOGLALÓ

Egy molekula nem tartalmaz mást, csak atommagokat és egy elektronsűrűség felhőt; ez a felhő az, ami a molekulát összetartja, ez a felhő adja a kémiai kötést. Az elképzelt “kémiai kötés vonal” egy molekulán belül az nem egy fizikailag létező anyag, hanem a kvantumkémia előtti idők öröksége. Az elektronfelhők jelbeszéde világos, ha figyelünk a molekulák alakjának részleteire. Egy adott molekula elektronsűrűségi izokontúrja, MIDCO(d) egy zárt felszín amelynek mentén az elektronsűrűség értéke d konstans. Elég nagy d esetén, minden többatomos molekulában létezik legalább két, nem érintkező kontúr, MIDCO₁(d) and MIDCO₂(d), ezért a belsejükben lévő molekula részek között nincs kémiai kötés a d elektronsűrűségi szinten. Másrészt, egy eléggé alacsony d' sűrűség értéket választva, mindig létezik egy nagyobb MIDCO(d') ami tartalmazza a magasabb d sűrűség értékhez tartozó MIDCO₁(d) és MIDCO₂(d) mindegyikét. Ebből következik, hogy létezik kémiai kötés a molekula MIDCO₁(d) és MIDCO₂(d) kontúrokon belüli részei között, de az alacsonyabb d' elektronsűrűség értékénél.

Kulcsszavak: elektronsűrűség felhő, izokontúrok, molekula fragmensek közötti kötés