

Kimyasal Bağlar

Kimyasal bileşiklerde atom, iyon ve molekül gibi temel kimyasal birimleri bir arada tutan çekme kuvvetlerine genel olarak **kimyasal bağ** denilmektedir.

Kuantum mekaniği ile moleküllerdeki elektron dağılımı, enerji düzeyleri, bağ uzunlukları, bağlar arasındaki açılar, elektrik dipol momentleri, ve basit moleküllerin bazı spektroskopik özellikleri bulunabilmektedir. Kuantum mekaniğine göre çekme ve itme kuvvetleri toplamının minimum olduğu durum **kimyasal bağ** olarak tanımlanmaktadır.

Burada yalnızca moleküllerin oluşumunda ortaya çıkan kovalent bağlar incelenecektir.

Çok atomlu moleküller için Hamiltonien operatörü genel olarak aşağıdaki gibi yazılır.

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_j \frac{1}{m_j} \nabla_j^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu} \sum_i \nabla_i^2 + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i, i' > i} \frac{1}{r_{i i'}} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i, j} \frac{Z_j}{r_{i j}} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{j, j' > j} \frac{Z_j Z_{j'}}{R_{j j'}}$$

Buradaki, birinci ve ikinci terimler sırayla çekirdek ve elektronların kinetik enerjilerini, üçüncü terim elektronlar arasındaki itmelerden kaynaklanan potansiyel enerjileri, dördüncü terim çekirdekler ve elektronlar arasındaki çekmelerden kaynaklanan potansiyel enerjiler, beşinci terim ise çekirdekler arasındaki itmelerden kaynaklanan potansiyel enerjileri göstermektedir.

Operatördeki,

M_j çekirdeklerin kütlelerini,

m elektron kütlelerini,

$r_{i i'}$ elektronlar arasındaki uzaklıkları,

$r_{i j}$ elektronların çekirdeklere uzaklıklarını,

$R_{j j'}$ ise çekirdekler arasındaki uzaklıkları,

göstermektedir.

Moleküller için yazılan Schrödinger denklemleri genellikle varyasyon yöntemi ile yaklaşık olarak çözülmektedir. Varyasyon eşitliğindeki deneme fonksiyonunun seçilmesine bağlı olarak **değerlik bağ (valance-bond, VB) kuramı** ve **moleküler orbital (MO) kuramı** adı verilen benzer iki yaklaşık hesaplama tekniği ortaya konulmuştur. Bu iki yöntem kovalent bağ oluşumu ve molekül yapısının aydınlatılmasına büyük katkıları olmuştur.

Born-Oppenheimer yaklaşımına göre, indirgenmiş kütle yerine elektronun kütlesi alınarak yazılan Hamiltonien operatöründe, çekirdeklerin kinetik enerjilerinin toplamını veren birinci terim elektronların kinetik enerjilerinin toplamını veren ikinci terim yanında ihmal edilemekte ve çekirdekler arasındaki itmelerden kaynaklanan potansiyel enerjilerin toplamını veren beşinci terimin sabit kaldığı varsayılmaktadır.

Kimyasal bağ konusu ders kitabının 930-932 sayfalarında detaylı olarak ele alınmıştır.