



Kajtar Márton Emlékkülés

2015

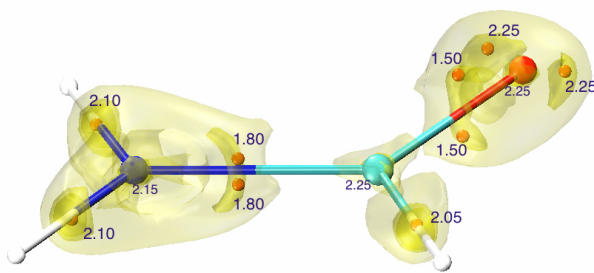
## Párcapcsolatok az elektronok világában, avagy mi tartja össze a molekulákat?

Ángyán János

CRM2, Institut Jean Barriol, Université de Lorraine,  
Vandœuvre-lès-Nancy, France, janos.angyan@univ-lorraine.fr

A Lewis-féle elektronpár-kötés modell 2016-ban lesz 100 esztendő. Azóta generációk nőttek fel, akik ennek a lényegében fenomenológikus elméletnek keretében tanulták, értelmezték és tanították a kémiát. Vajon miért is működik a Lewis modell? Milyen alapvető fizikai törvényekkel tudjuk megmagyarázni az elektronpárok kulcsszerepét? Tényleg ott vannak-e az elektronpárok, ahová egy szerkezeti képletben rajzolni szokás őket vonás vagy pontpár formájában? Figyelembe véve az elektronok hullámtermészetét, van-e egyáltalán értelme a molekuláris tér egy meghatározott szűk szeletéhez rendelni egy elektronpárt? Mit mond erről az elektronszerkezetet leíró hullámfüggvény?

Ezekre a kérdésekre szeretnék röviden kitérni, megmutatva, hogy az elektronpárok léte a Pauli-féle kizárási elv egyenes következménye, ami a hullámfüggvényből számítható párel-oszlási függvény tulajdonságaiban tükröződik. A párel-oszlási függvény egy viszonylag egyszerű matematikai transzformációjával el lehet érni, hogy az elektronokat az elektronpárok által elfoglalt térrészből mintegy "szénakazlakba" gyűjtsük, amelyeknek elhelyezkedése és populációja általában a Lewis modellel illetve annak továbbfejlesztett változaival jó összhangban van. Ennek az újszerű, a lokalizációt jellemző függvénynek a teljesítőképességét néhány egyszerű példán mutatom be.



A formamid molekula elektronpárjainak ábrázolása a "szénakazal transzformáció" segítségével. Az ábrán látható számok az ábrázolt függvény topológiai partícióval kapott attraktorainak közelítő populációi.