

A molekulapálya elmélet szerint az atompályákból olyan molekulapályák jönnek létre amelyeken lévő elektronok a molekula egészéhez tartoznak.

Kötőpályák: az ilyen pályák energiája kisebb mint azon eredeti atompályáké amelyek kombinációjából kialakultak.

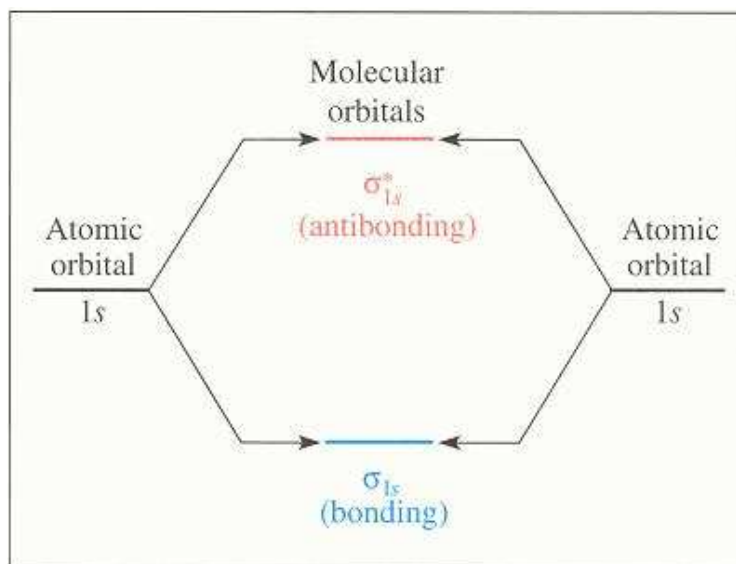
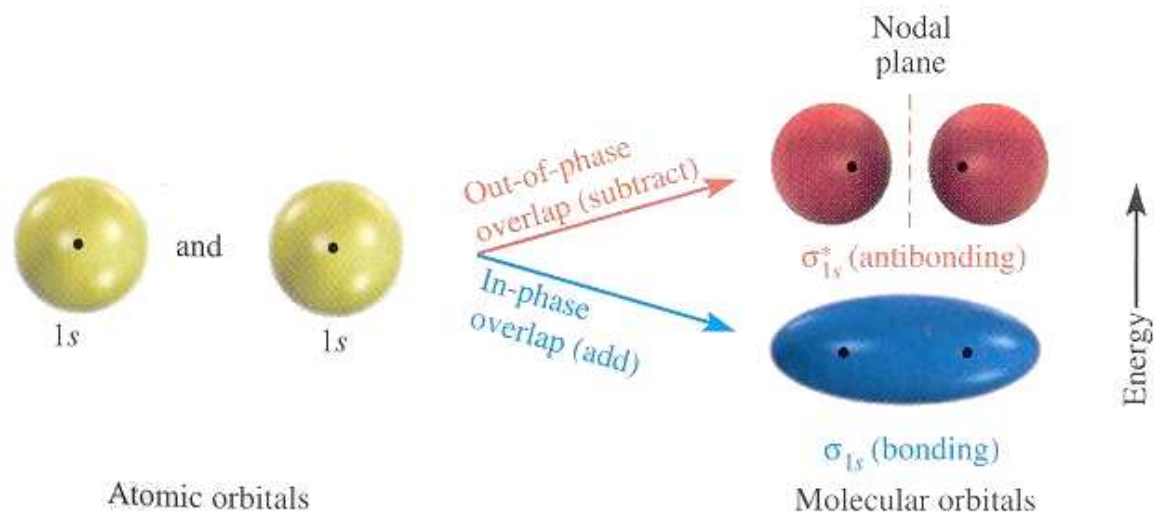
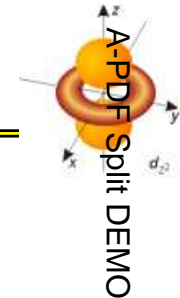
Lazítópályák: az ilyen pályák energiája nagyobb mint azon eredeti atompályáké amelyek kombinációjából kialakultak.

Kötésrend:

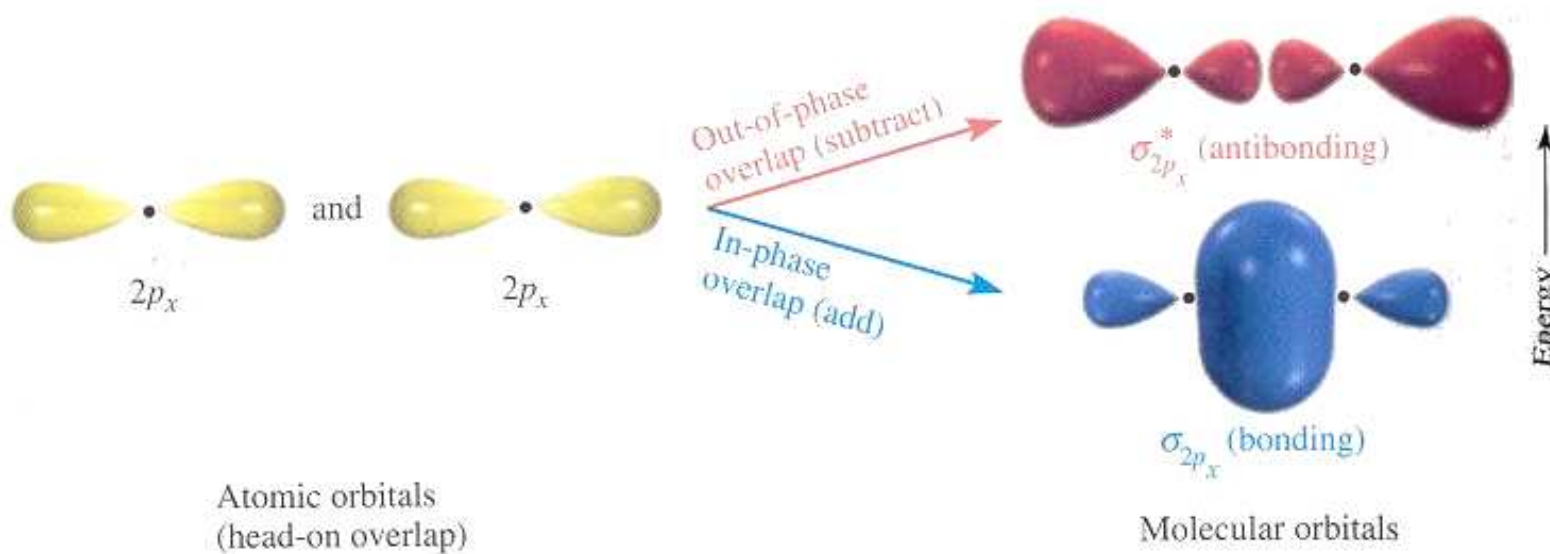
$$\frac{(\text{kötőpályán lévő elektronok száma}) - (\text{lazítópályán lévő elektronok száma})}{2}.$$

A nagyobb kötésrend rövidebb és erősebb kötés kialakulását jelzi.

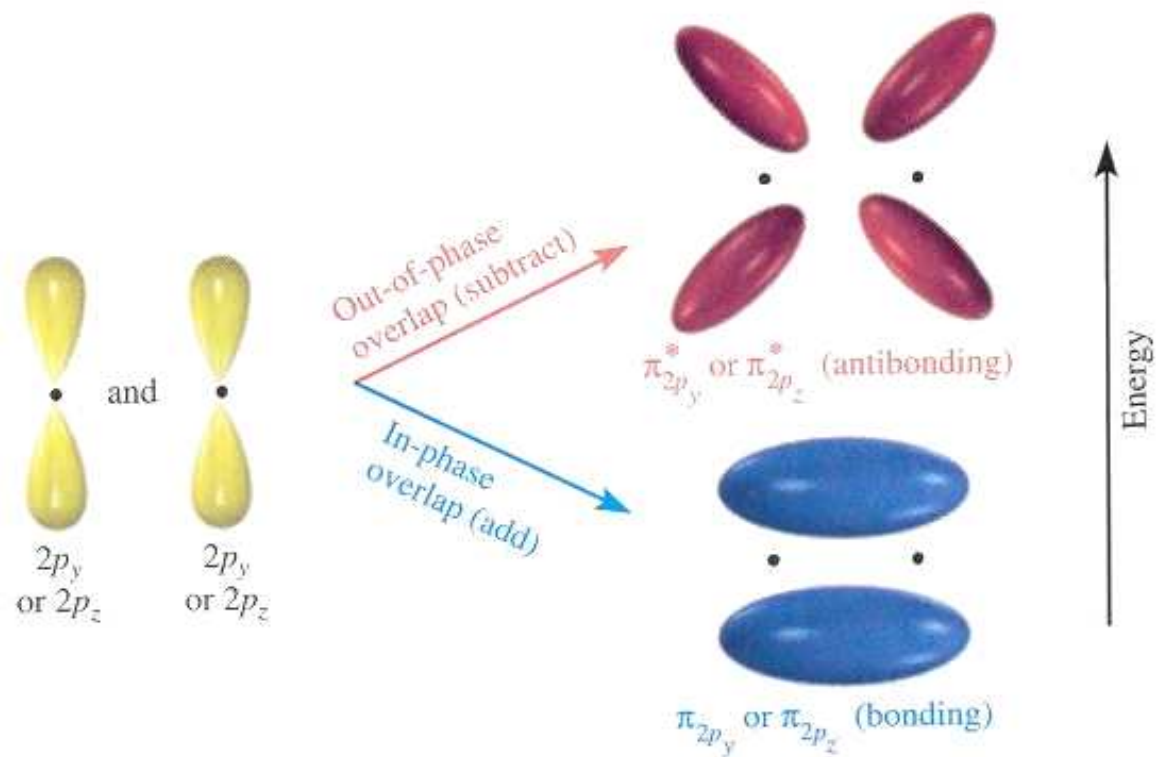
Molekulapálya-elmélet (MO)



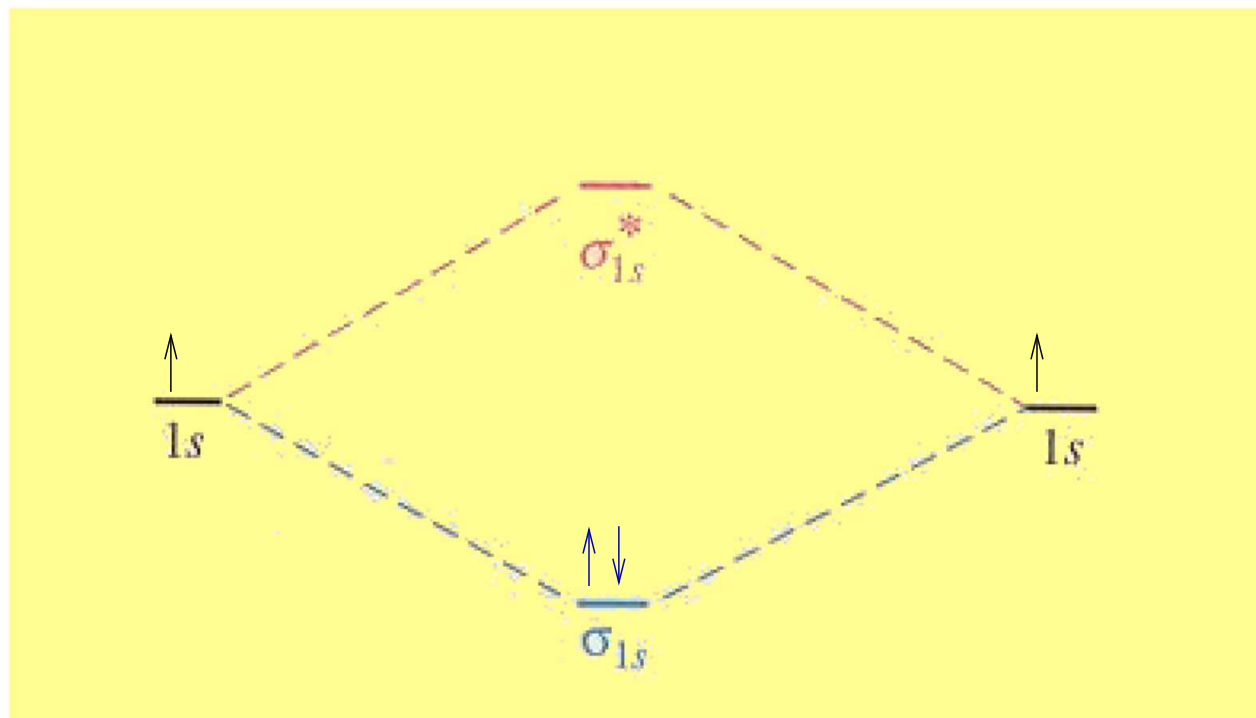
Molekulapálya-elmélet (MO)



Molekulapálya-elmélet (MO)

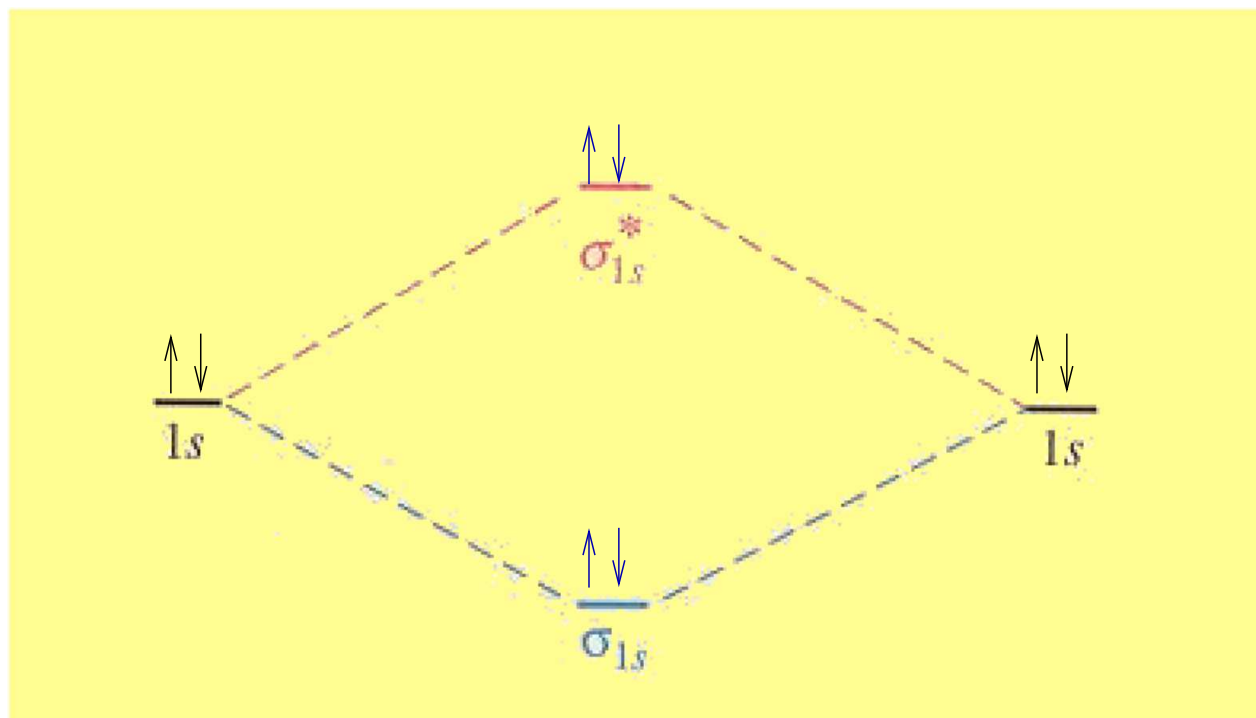


Hidrogén H_2



Stabil?	igen
Kötésrend	1
Paramágneses?	nem

Hélium He_2



Stabil? nem

Kötésrend 0

Paramágneses? nem

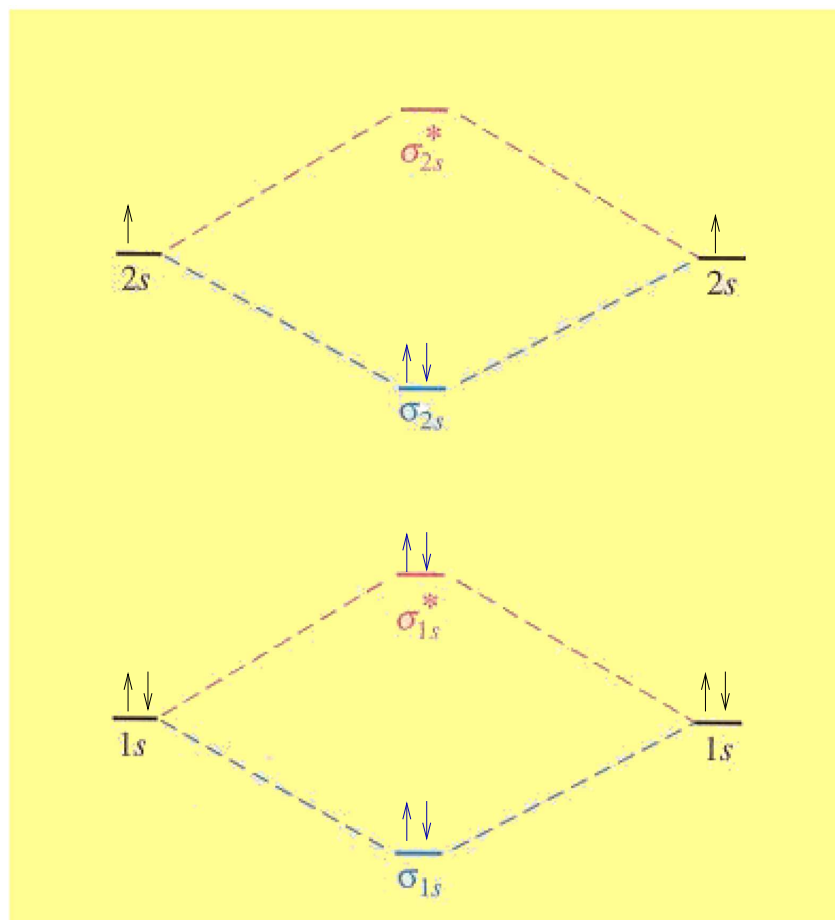
Lithium Li_2

Stabil? igen

(csak gázfázisban létezik)

Kötésrend 1

Paramágneses? nem

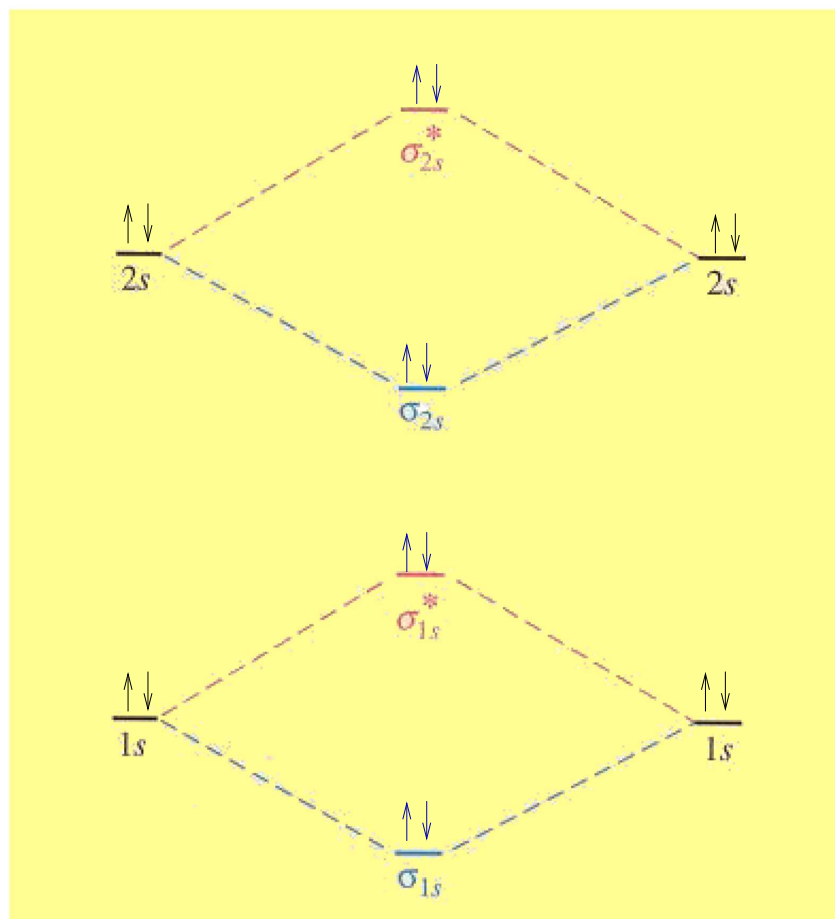


Berílium Be_2

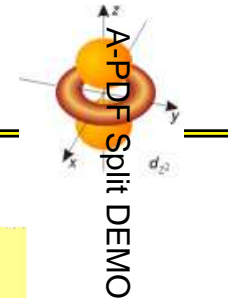
Stabil? nem

Kötésrend 0

Paramágneses? nem



Molekulapálya-elmélet (MO)



Bór B_2

Stabil?

igen

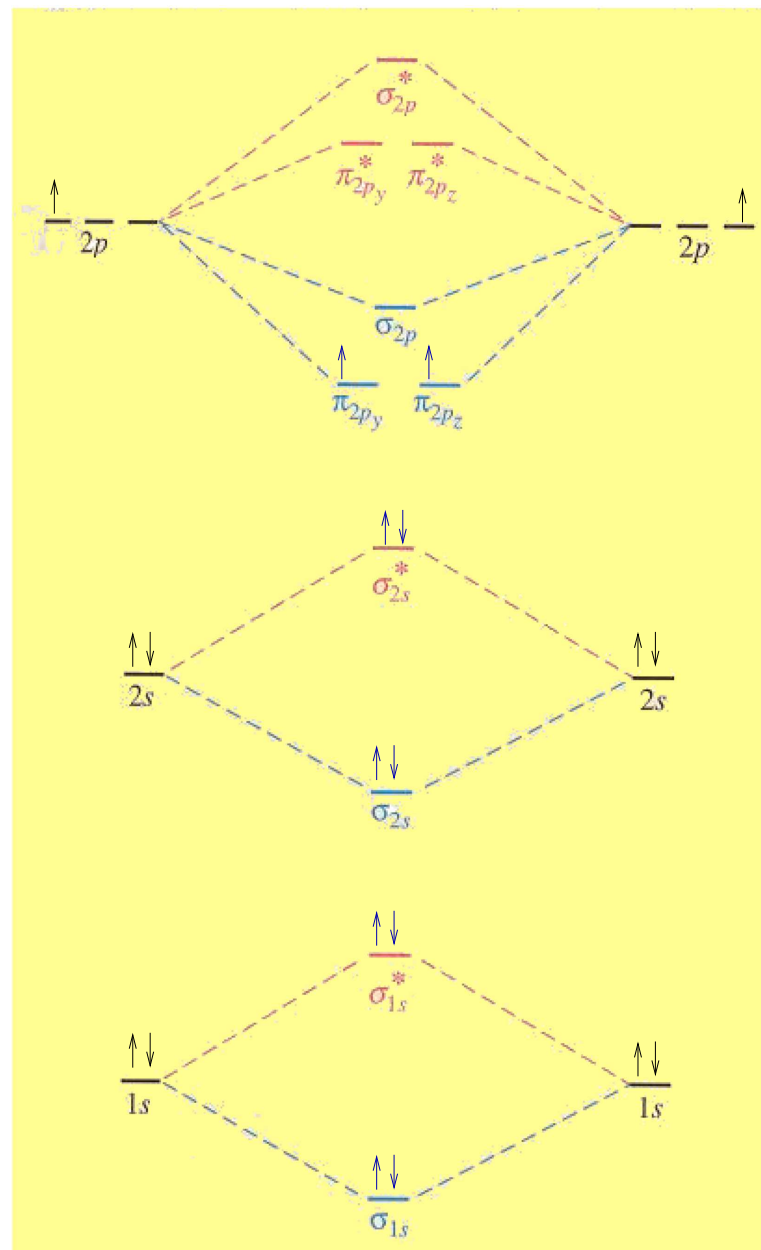
(csak gázfázisban létezik)

Kötésrend

1

Paramágneses?

igen



Molekulapálya-elmélet (MO)



Szén C_2

Stabil?

igen

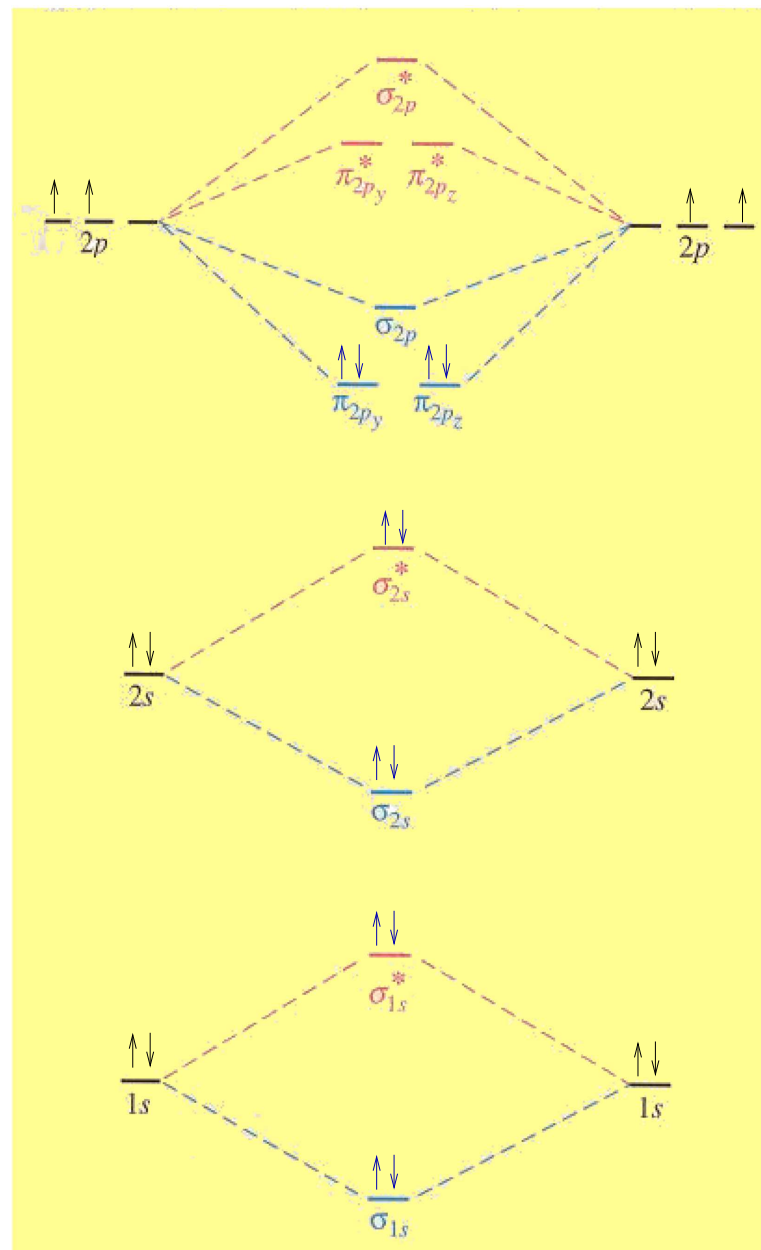
(csak gázfázisban létezik)

Kötésrend

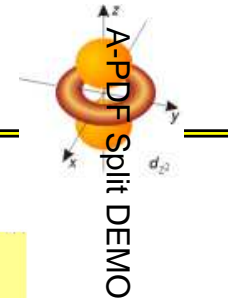
2

Paramágneses?

nem



Molekulapálya-elmélet (MO)

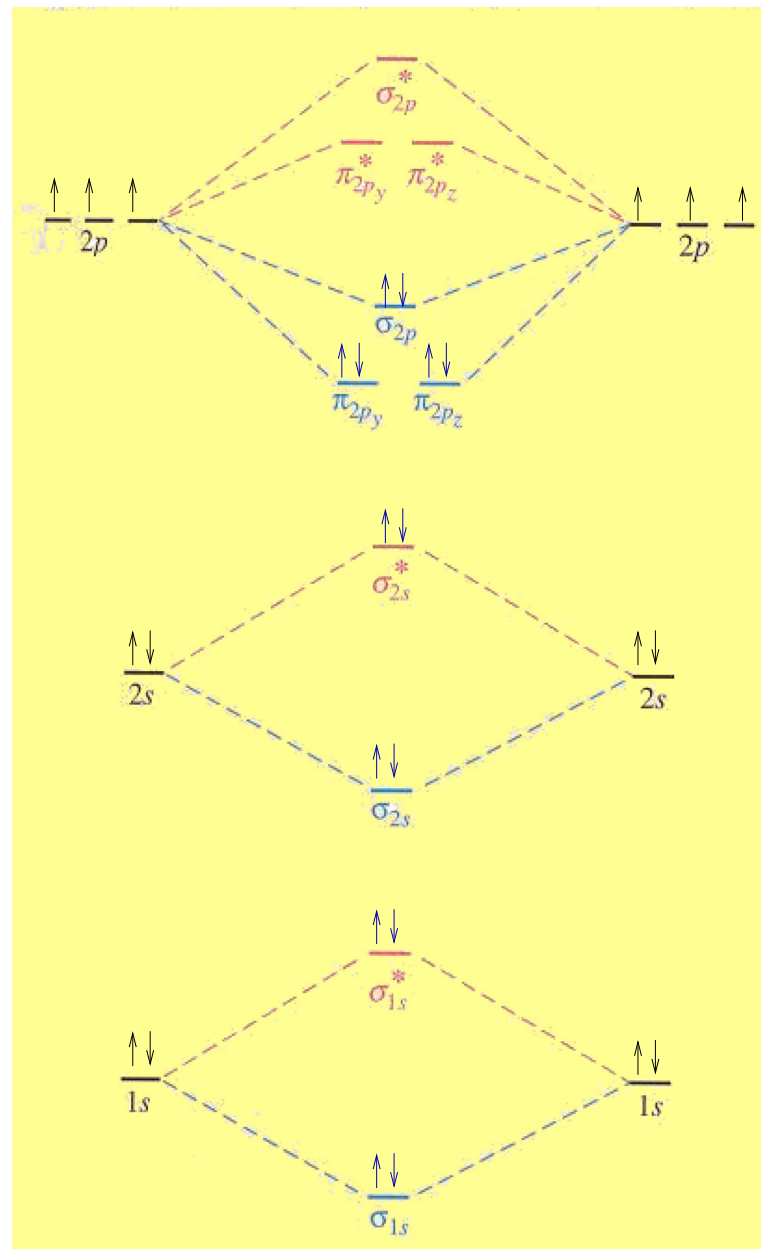


Nitrogén N_2

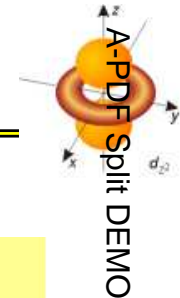
Stabil? igen

Kötésrend 3

Paramágneses? nem



Molekulapálya-elmélet (MO)



Oxigén O_2

Stabil?

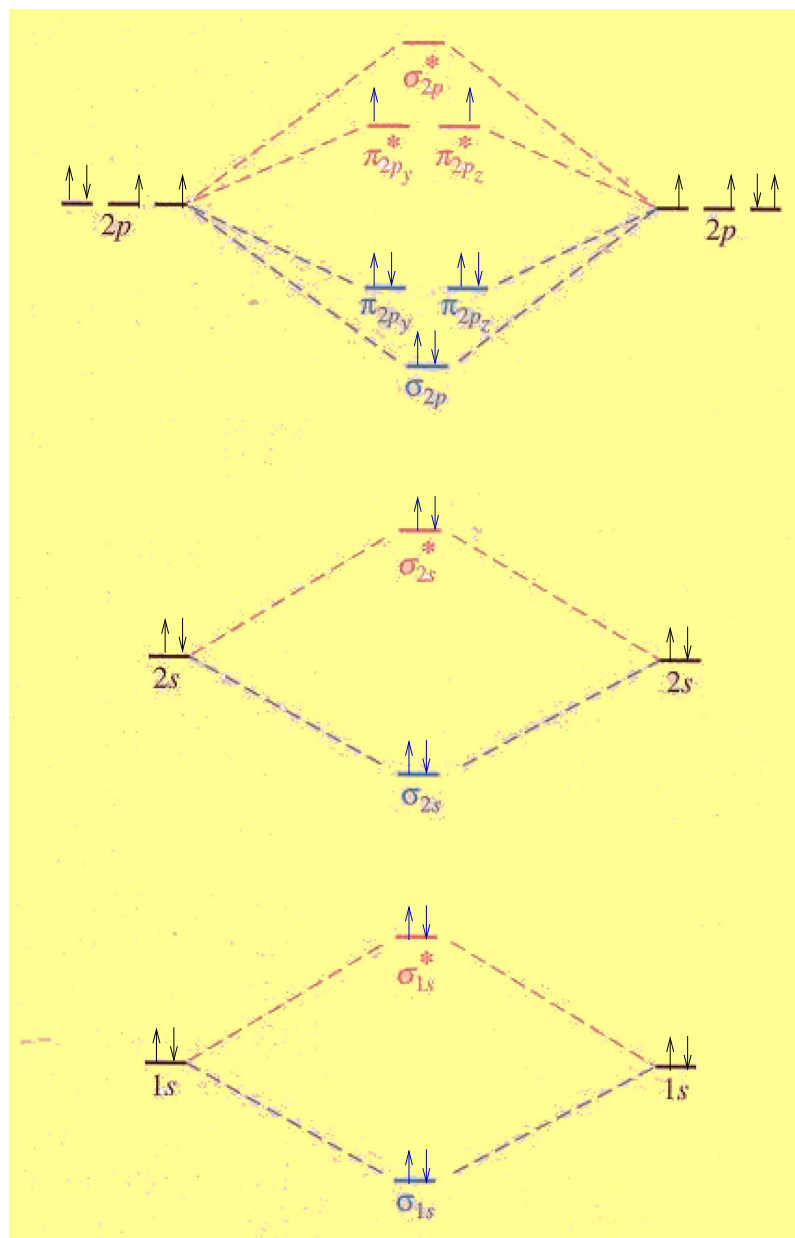
igen

Kötésrend

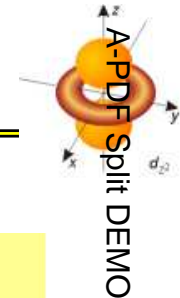
2

Paramágneses?

igen



Molekulapálya-elmélet (MO)



Fluor F_2

Stabil?

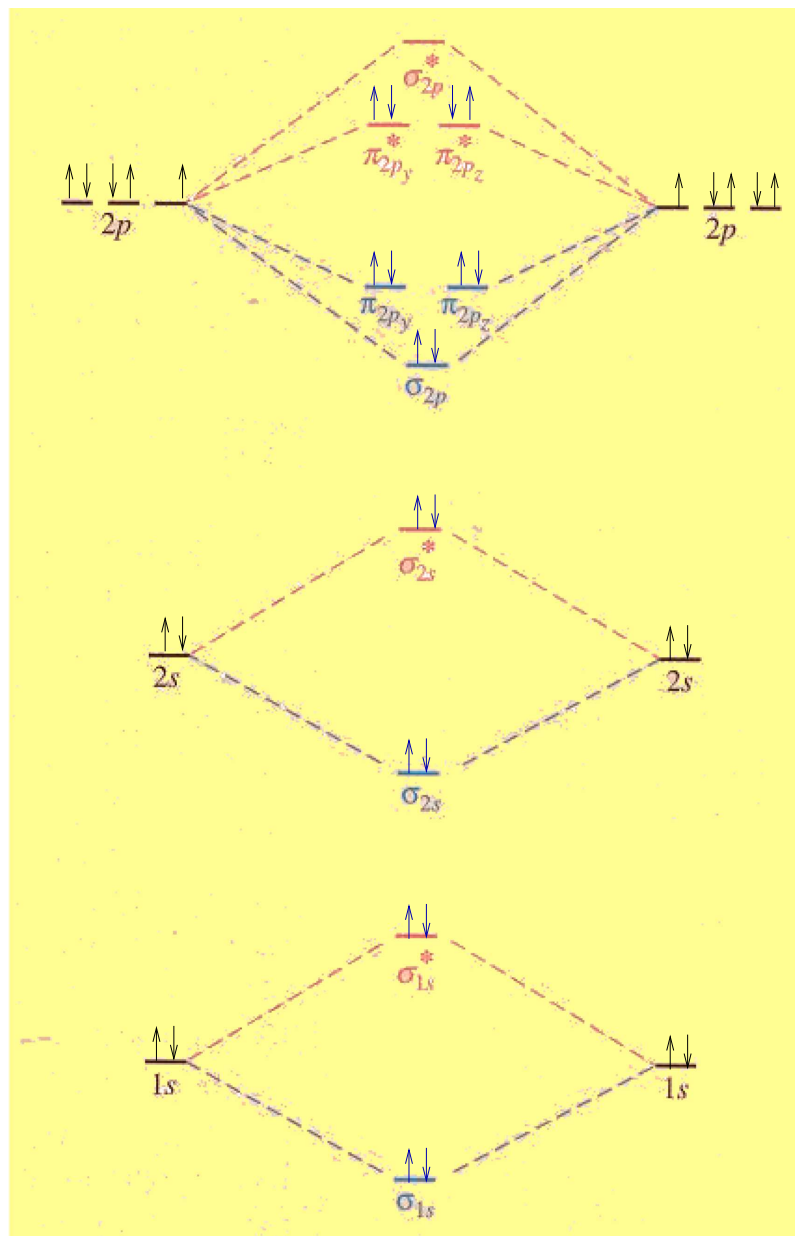
igen

Kötésrend

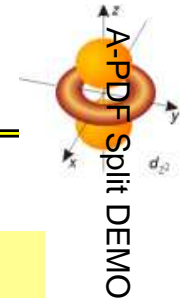
1

Paramágneses?

nem



Molekulapálya-elmélet (MO)



Neon N₂

Stabil?

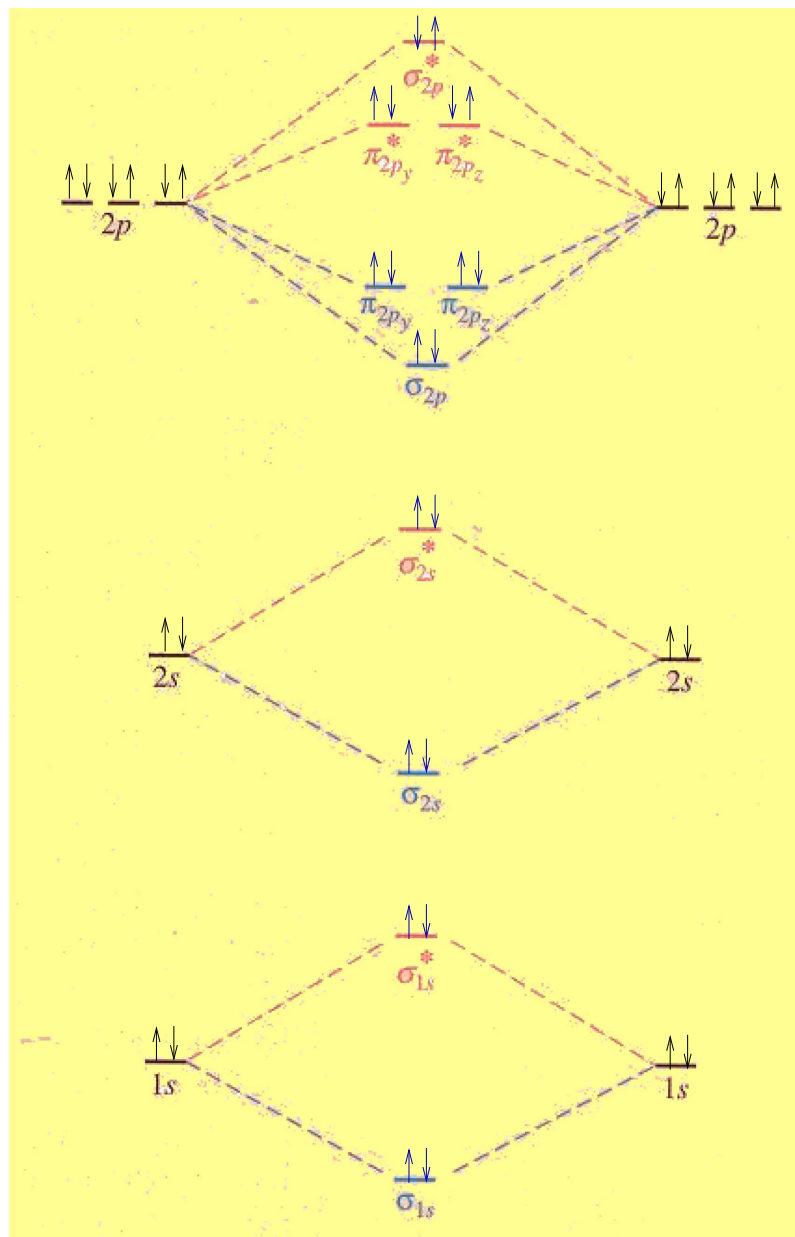
nem

Kötésrend

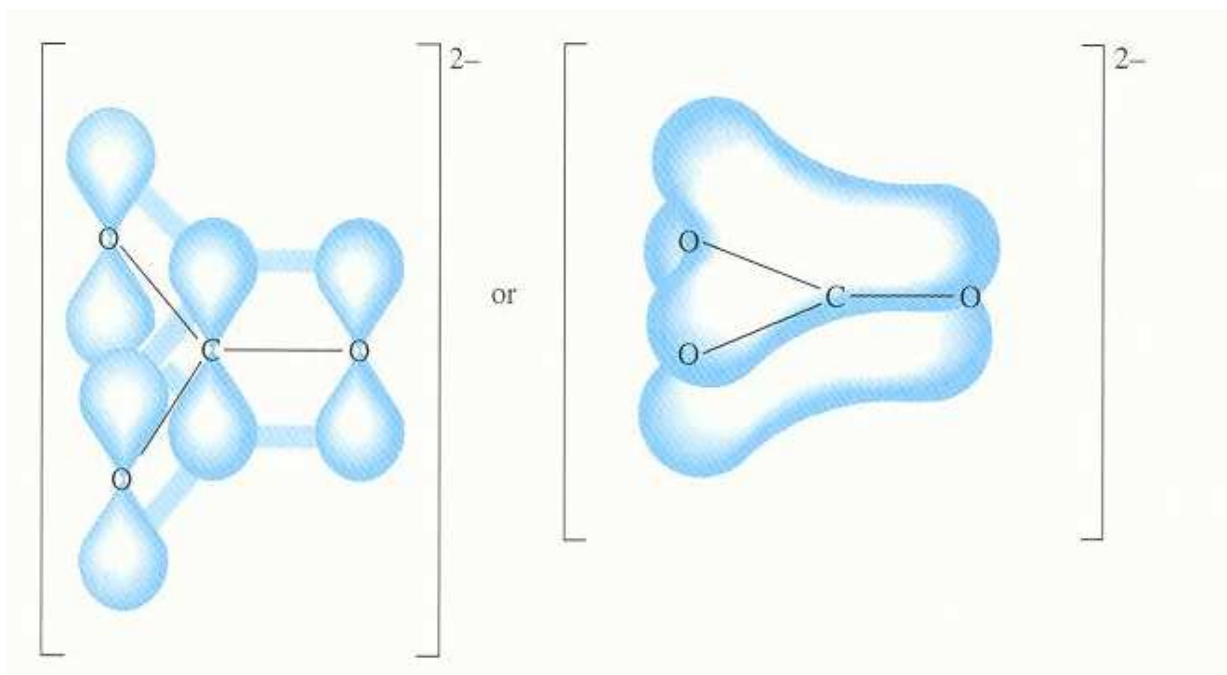
0

Paramágneses?

nem

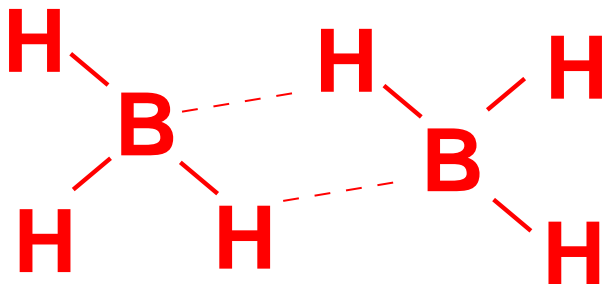


Karbonátion, CO_3^{2-}
(delokalizált pályák)



Borán BH_3

Diborán



Elektronpárok száma: 6

Kötések száma: 8

W. N. Lipscomb kémiai Nobel díj, 1976.