الأوربيتالات الجزيئية في الجزيئات الثنائية الذرة التي تحتوي على ذرتين مختلفتين:-

هنا لا تختلف طريقة تكوين الأوربيتالات الجزيئة في الجزيئات الثنائية الذرات التي تحتوي على ذرتين مختلفتين عن طرقة تكوينها في الجزيئات الثنائية الذرات التي تحتوي على ذرتين متشابهتين ويبقى أهم اختلاف بين هذين النوعين من الجزيئات في ان الجزيئات الغير متجانسة الذرات تكون طاقة الاوربيتالات الذرية غير متساوية فنلاحظ عدم انتظام مخطط الطاقة كما فب حالة الجزيئات المتجانسة والسبب يعود الى عدم تساوي طاقة الاوربيتالين الذريين ويظهر هذا الاختلاف من المعادلات التالية:-

$$\psi_b = \psi_A + \lambda\psi_B$$
$$\psi_b = \psi_A - \lambda\psi_B$$

وهنا تكون قيمة λ غير مساوية إلى الواحد الصحيح كون الذرات في هذه الحالة غير متشابهة بينما في حالة الجزيئات المتجانسة يساوي واحد لأن الذرات متشابهة كما يعتمد تكون الأوربيتالات الجزيئية في الجزيئات غير المتجانسة على شرطين أساسيين:-

(1) أن يكون التماثل للأوربيتالن الذريين ψ_A و ψ_B متشابهاً.

(2) أن تكون طاقة الأوربيتالين الذريين متقاربة.

فاذا كانت طاقة الأوربيتالين الذريين مختلفة اختلافاً كبيراً فان قيمة λ تكون في هذه الحالة قليلة جداً وسوف ينتج عن ذلك:-

$$\psi_b \approx \psi_A$$
$$\psi_a \approx \psi_B$$

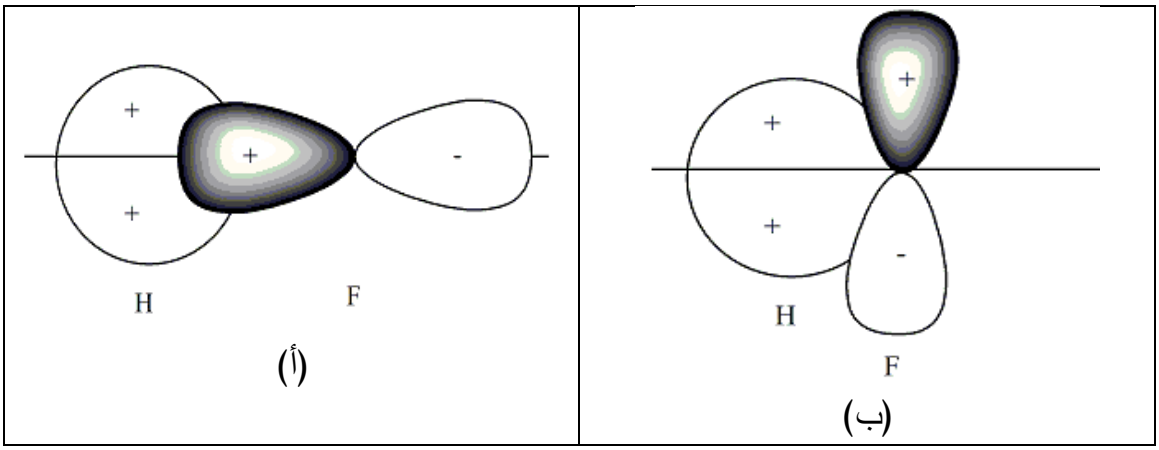
هذا يعني أن تداخل ψ_A مع ψ_B يكون معدوماً أي عدم حصول امتزاج بينهما ولعل الأمثلة التالية توضح هذه المباديء:-

(1) جزيئة فلوريد الهيدروجين (HF) :-

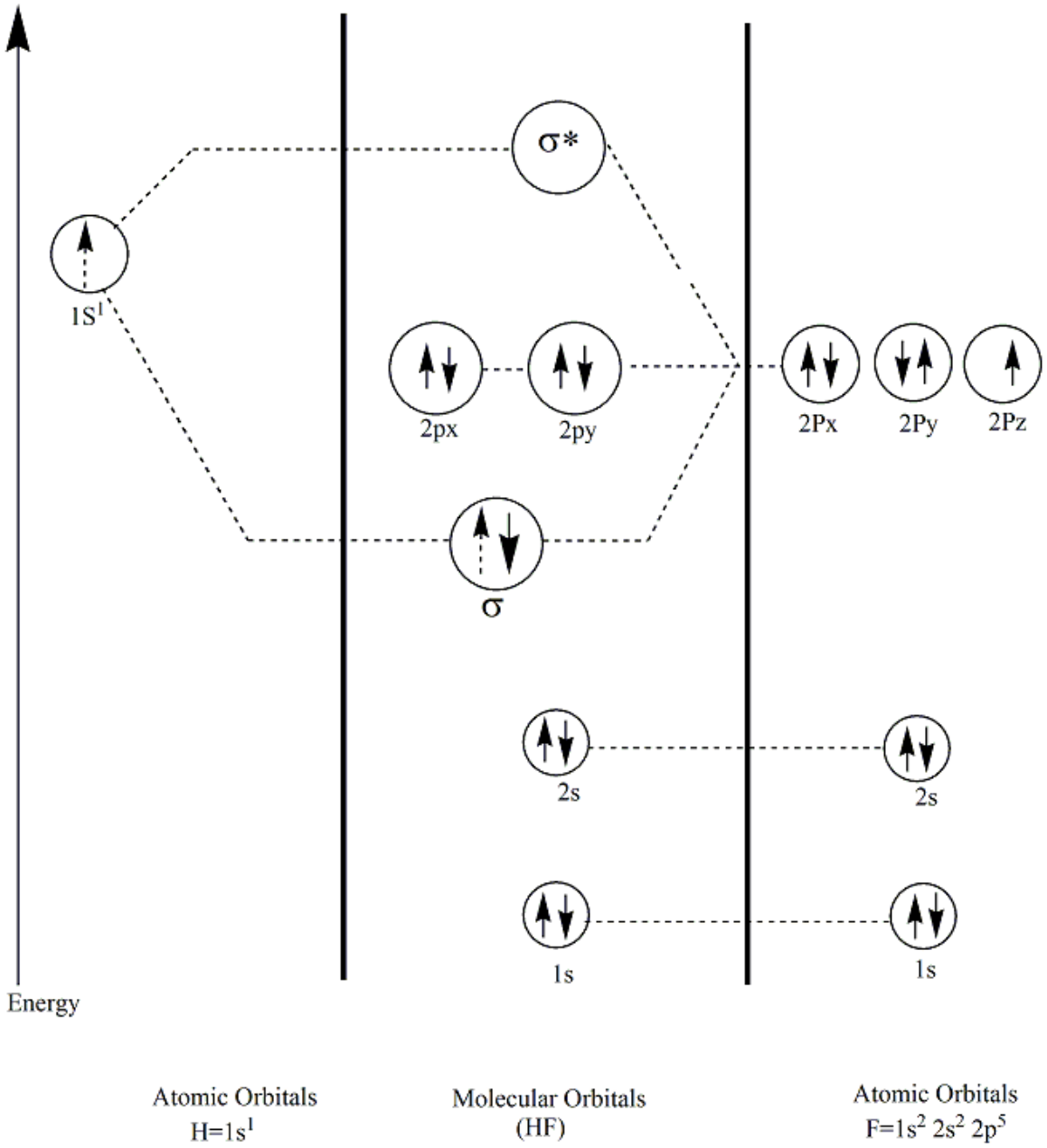
الترتيب الألكتروني للهيدروجين = $1s^1$

الترتيب الألكتروني للفلور = $1s^2 2s^2 2p^5$

إذا فرضنا إن محور الآصرة بين الفلور والهيدروجين (H-F) هو المحور السيني (X) فان الآصرة في هذه الحالة سوف تتكون نتيجة لتداخل أوربيتال (1S) من ذة الهيدروجين مع الأوربيتال ($2P_X$) من ذرة الفلور كما موضح بالشكل التالي (أ) بينما (ب) يوضح تداخل الأوربيتالين على المحور الصادي (y) مع ($2P_y$) :-



الشكل (أ) يبين تداخل أوربيتال (1S) من ذرة الهيدروجين مع أوربيتال ($2P_x$) من ذرة الفلور ويعطي هذا النوع من التداخل أكبر تداخل ممكن للأوربيتال (1S) مع ($2P_x$) والأوربيتالين المتداخلين لهما نفس الأشارة بينما في الشكل (ب) الذي يبين تداخل أوربيتال (1S) من ذرة الهيدروجين مع أوربيتال ($2P_y$) من ذرة الفلور فأن التداخل بين الأوربيتالين يعطي إشارتين مختلفتين فيلغي أحدهما الآخر وتكون محصلة التداخل صفر. لذلك فأن الآصرة بين الهيدروجين والفلور تعود بصورة رئيسية إلى تداخل الألكترون الموجود في (1S) من ذة الهيدروجين مع الألكترون الموجود في ($2P_x$) من ذرة الفلور أما الألكترونات الموجودة في ($2P_y$) و ($2P_z$) في ذرة الفلور فأن طاقتها لا تسمح لها بالأمتزاج مع أي من أوربيتالات الهيدروجين وتكون الألكترونات في هذه الحالة موجودة في أوربيتالات جزيئية من نوع أوربيتالات لاترابطية (non-bonding) حيث إنها لا تؤدي الى منع الأرتباط كما إنها لاتؤدي إلى زيادة الأرتباط.



(2) جزيئة أول أوكسيد الكاربون (CO) :-

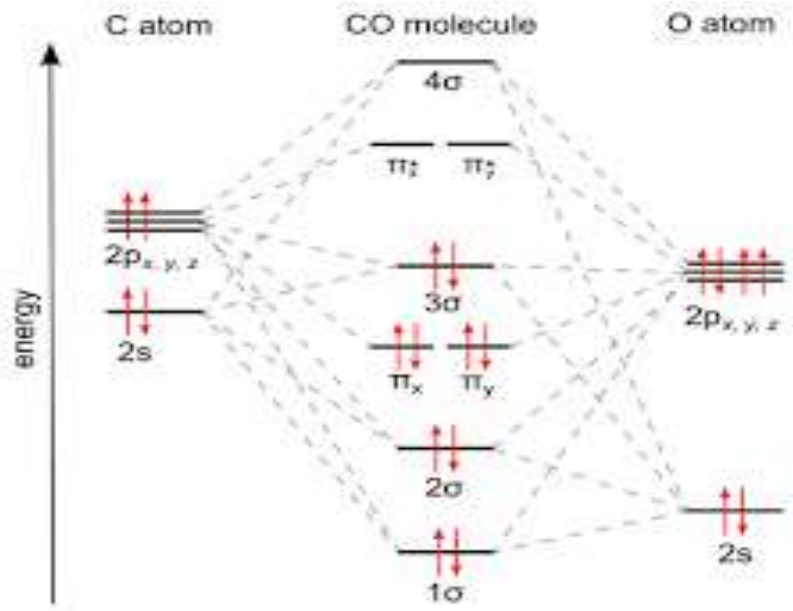
المحاضرة الثالثة عشرة

الترتيب الألكتروني للكاربون = $1s^2 2s^2 2p^2$

الترتيب الألكتروني للأوكسجين = $1s^2 2s^2 2p^4$

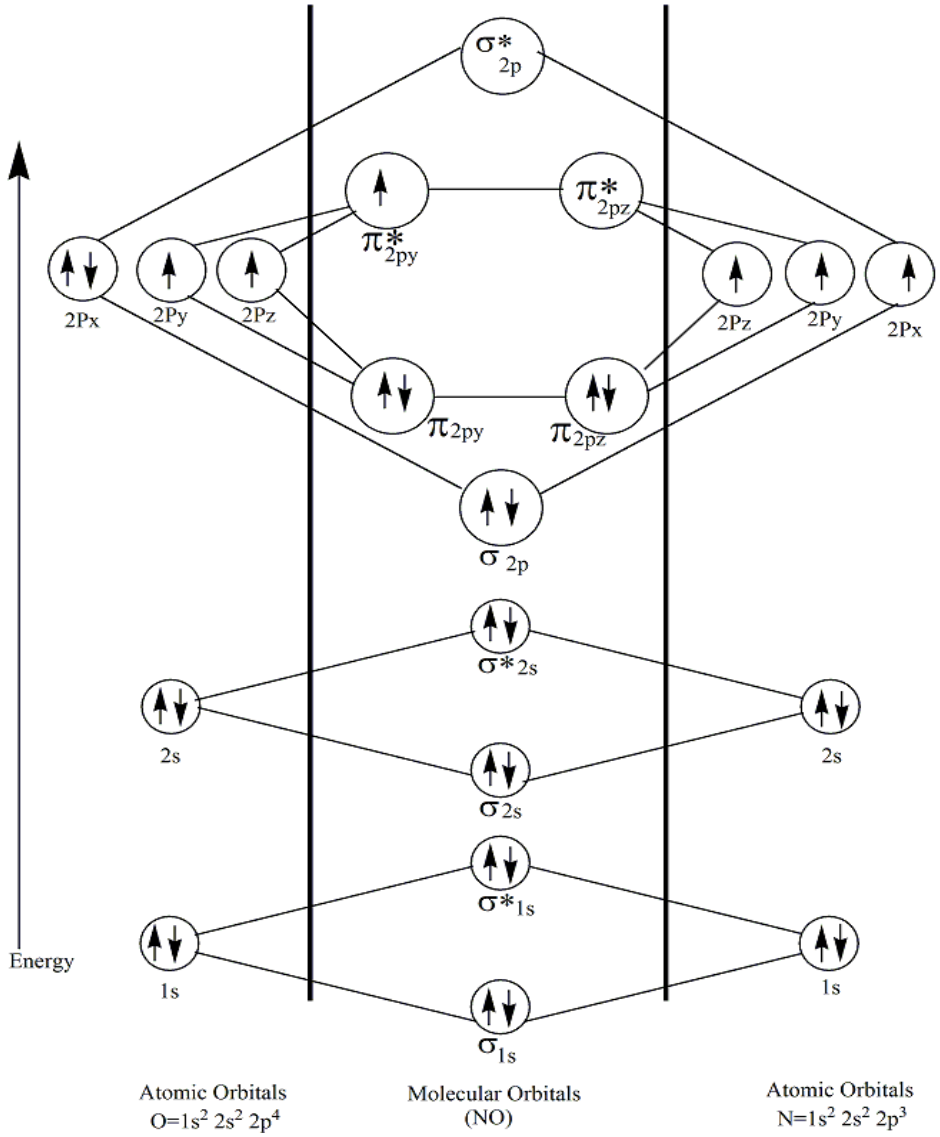
هنا تتشابه الأوربيتالات الذرية في ذرة الكاربون مع الأوربيتالات الذرية في ذرة الأوكسجين إلى حدٍ كبير لذلك فأن الأوربيتالات الجزيئية لجزيئة أول أوكسيد الكاربون تشابه إلى حدٍ كبير الأوربيتالات الجزيئية في الجزيئات الثنائية المتجانسة مع وجود فرق واحد فقط هو أن الأوربيتالات الذرية لذرة الأوكسجين غير متجانسة تماماً مع الأوربيتالات الذرية لذرة الكاربون لذلك فأن الأوربيتالات الذرية لذرة الأوكسجين سوف تساهم بنسبة أكبر في الأوربيتالات الجزيئية الترابطية (Bonding Orbitals) بينما تساهم الأوربيتالات الذرية لذرة الكاربون بنسبة أكبر في تكوين الأوربيتالات الجزيئية المانعة للأرتباط (anti–bonding orbitals) . وجزيئة أول أوكسيد الكاربون الناتجة تكون ذات إستقطابية قليلة نسبياً لأن الألكترونات الثمانية الموجودة في الأوربيتالات الجزيئية الترابطية (Bonding Orbitals) تكون متمركزة حول ذرة الأوكسجين بقدر أكبر من تمركزها حول ذرة الكاربون.

رتبة الآصرة في جزيئة أول أوكسيد الكاربون تساوي (3) وهي مشابهة إلى جزيئة النتروجين (N_2) وتكونالآصرة ثلاثية واحدة منها آصرة منفردة من نوع سيكما (σ) وآصرتين من نوع باي (π) وقوة الآصرة تساوي (1073) كيلوجول لكل مول.

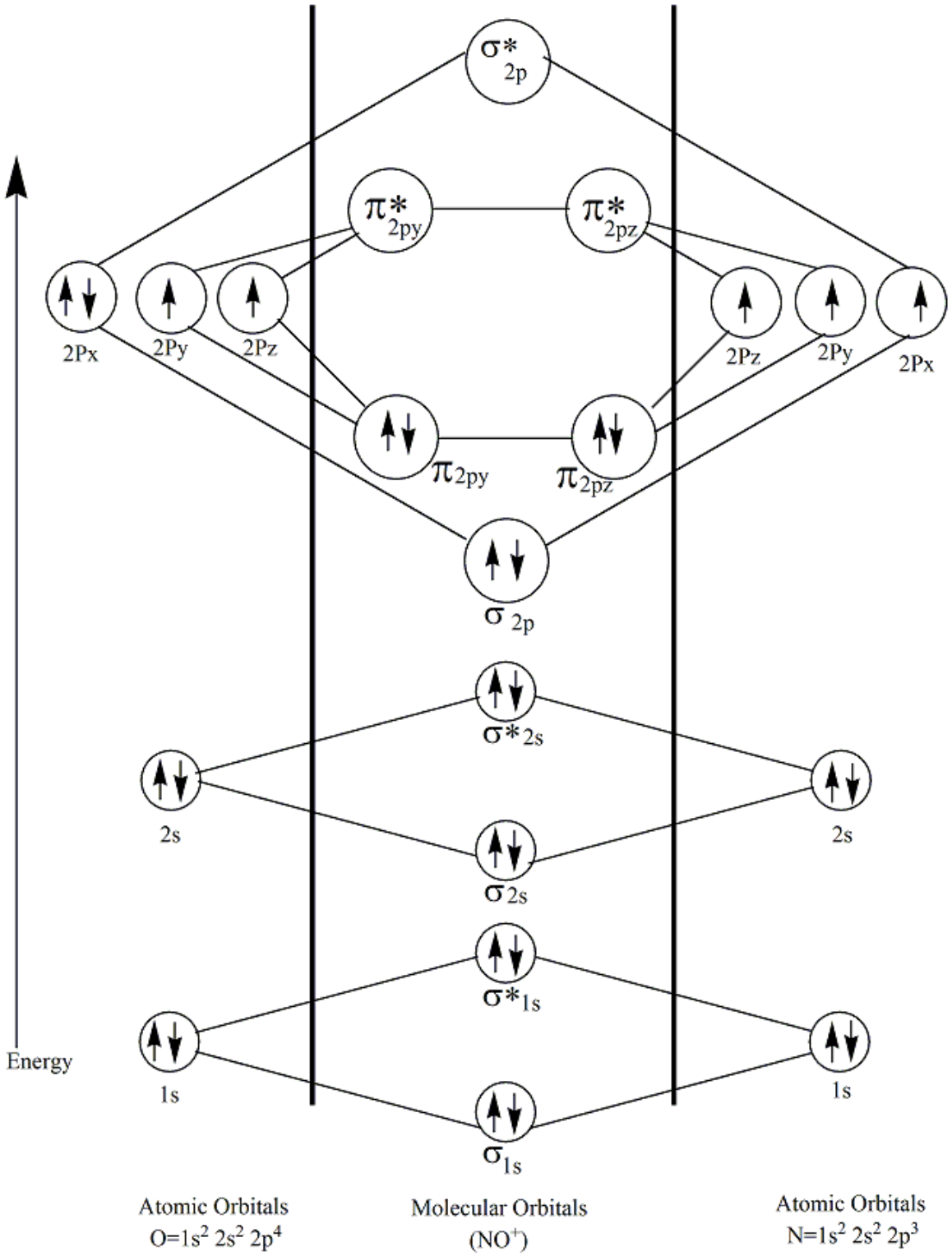


(3) جزيئة (NO) :-

في هذه الجزيئة تكون نتيجة امتزاج الأوربيتالات الذرية لذرتي النتروجين والأوكسجين مشابه لجزيئة الأوكسجين مع وجود فرق واحد هو وجود ألكترون واحد في الأوربيتال الجزيئي مضاد للأرتباط أو مانع الأرتباط (anti-bonding orbital) (π^*) ولهذا السبب فأن جزئة (NO) تكون غير مستقرة وتفقد بسهولة هذا الألكترون المتواجد في الأوربيتال مضاد الارتباط مولدة أيون موجب (NO^+) يكون أكثر استقراراً من (NO) وله قوة آصرة أكبر من قوة الآصرة في (NO) .



جزيئة (NO)



أيون (NO^+) الموجب