نظریه اوربیتال مولکولی (MO)[i]

نظریه دیگری که برای تشریح چگونگی تشکیل پیوند کوالانسی پیشنهاد شده است، نظریه اوربیتال مولکولی است. در این روش فرض بر این است که وقتی دو اتم برای تشکیل پیوند به یکدیگر نزدیک می‌شوند، اوربیتالهای اتمی آنها با یکدیگر ترکیب شده و به وضع جدیدی در می‌آیند که آنها را اوربیتالهای مولکولی می‌گویند. اوربیتالهای مولکولی مربوط به تمام مولکول هستند و بنا به همان اصل " آفبا " و با روشی مشابه با آنچه که در مورد جای دادن الکترونها در اوربیتالهای اتمی دیدیم، الکترونهای اتمهای سازنده مولکول، در این اوربیتالها قرار می‌گیرند. همانطور که اوربیتالهای اتمی را با حروف s ، p ، d و f مشخص کردیم، در اینجا نیز اوربیتالهای مولکولی را با حروف s ، p و d مشخص می‌کنیم. در این مورد نیز اصل طرد پائولی و قاعده هوند رعایت می‌شود.

باید توجه داشت که معادله شرودینگر در مورد مولکولها، حتی مولکول ساده‌ای مانند هیدروژن، خیلی پیچیده‌تر از معادله شرودینگر برای اتم هیدروژن است. به این جهت در حل معادله شرودینگر برای بدست آوردن اوربیتالهای مولکولی دچار اشکال می‌شویم و قادر به حل دقیق معادله شرودینگر نخواهیم بود و ناچاریم شکل تقریبی توابع موجی اوربیتالهای مولکولی را با استفاده از روشهای دیگری بدست آوریم. روشهای متعددی برای بدست آوردن شکل تقریبی اوربیتالهای مولکولی وجود دارد که در اینجا یکی از آنها را بررسی می‌کنیم. این روش عبارت از ترکیب خطی اوربیتالهای اتمی است $(LCAO)$[ii]. در این روش فرض بر این است که شکل تقریبی اوربیتالهای مولکولی، از ترکیب اوربیتالهای اتمی سازنده مولکول بدست می‌آیند. دلیل چنین فرضی این است که در هر زمان معین، الکترون به یک هسته نزدیکتر است و در این حالت رفتار الکترون مزبور کم و بیش شبیه رفتاری است

www.ShimiPedia.ir
شبکه رشد – شبکه ملی مدارس ایران

که آن الکترون، در اوربیتال اتمی آن هسته داراست. در این صورت به احتمال زیاد، اوربیتالهای مولکولی باید شبیه اوربیتالهای اتمی آن دو اتم باشد. بنابراین اگر توابع موجی اوربیتالهای اتمی دو اتم y_A و y_B باشد، توابع تقریبی اوربیتالهای مولکولی که از انطباق این اوربیتالهای اتمی بر روی یکدیگر بوجود می‌آید به شکل $y_A \pm y_B$ است. این گونه جمع جبری را ترکیب خطی می‌نامند.

---

1. *Molecular Orbital Theory*

2. *Linear Combination of Atomic Orbital*

شبکه رشد – شبکه ملی مدارس ایران
www.ShimiPedia.ir