

www.ShimiPedia.ir

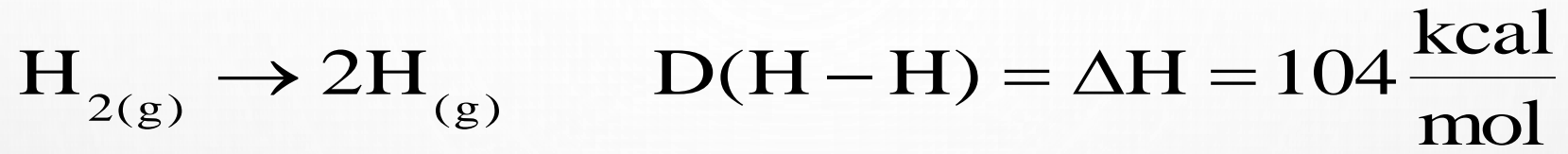
فصل دوم

پیوندهای شیمیایی

گروه آموزشی شیمی ناحیه ۲ ری

www.ShimiPedia.ir

انرژی تفکیک پیوند: عبارت است از میزان انرژی لازم برای شکستن یک پیوند
بین دو اتم گازی در یک مولکول گازی
شکل.



انرژی تفکیک یک پیوند در درجه اول به خواص دو اتم و همچنین تا حدی به نوع سایر اتمهای
موجود در مولکول نیز بستگی دارد.

انرژی متوسط پیوند: مقدار تقریبی انرژی لازم برای شکستن یک پیوند معین در ترکیبات مختلف را
انرژی متوسط پیوند می‌گوئیم.

طول پیوند: فاصله متوسطی که بین هسته اتمهای پیوند یافته وجود دارد را طول پیوند می‌گوئیم.

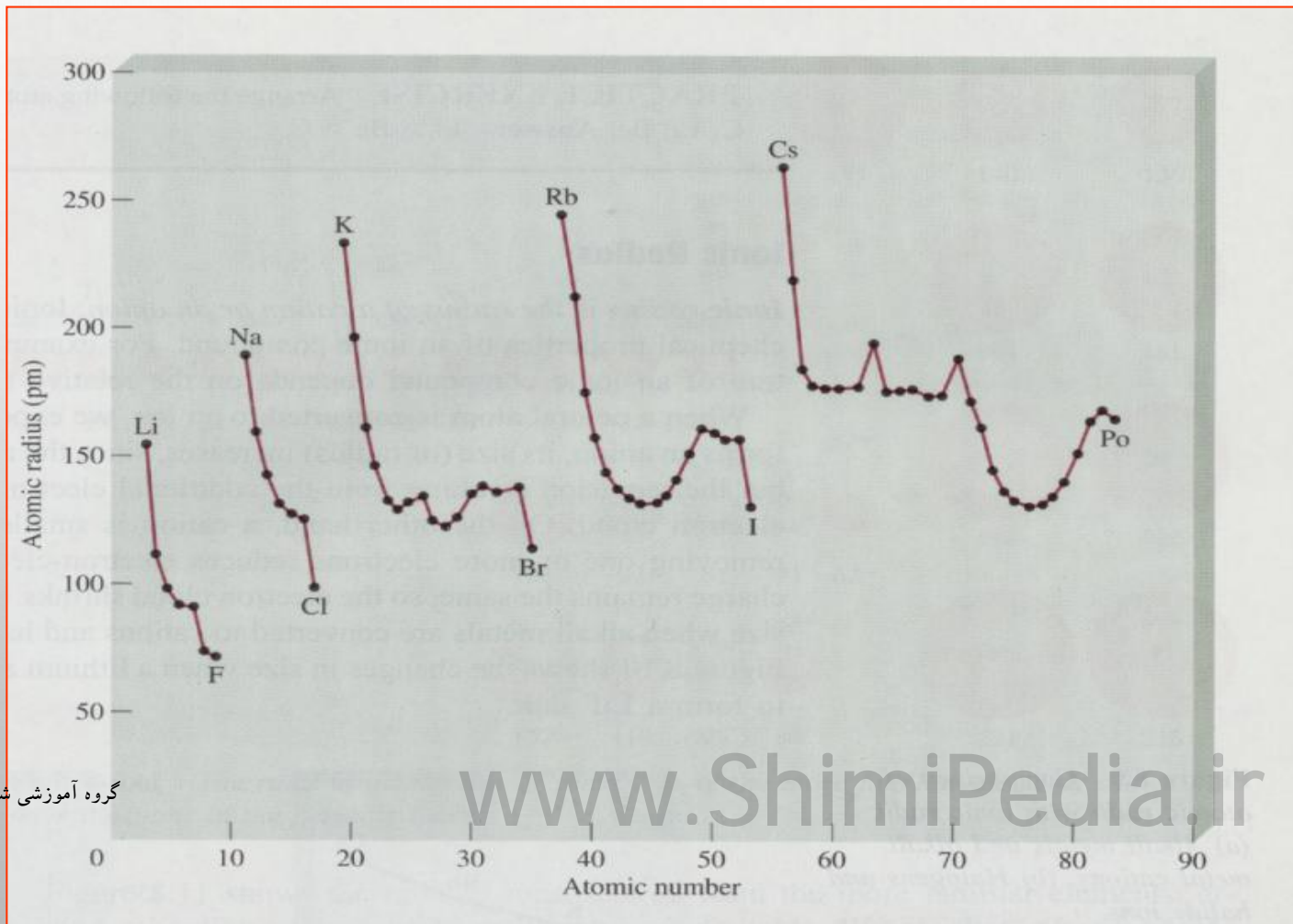
شعاع اتمی: تعیین شعاع دقیق اتم ممکن نیست چون تعیین

مکان و سرعت حرکت الکترون در اطراف هسته اتم ممکن نیست ولی برای اینکه تخمین از اندازه اتم داشته باشیم از شعاع کووالانسی بجای شعاع اتمی استفاده می‌کنیم.

شعاع کووالانسی: نصف فاصله بین هسته دو اتمی یکسان را در یک مولکول

دو اتمی، شعاع کووالانسی می‌گوئیم. www.ShimiPedia.ir

در يك گروه از عناصر جدول تناوبي از بالا به پائين با زياد شدن تعداد لايه‌ها، شعاع اتمي افزايش مي‌يابد. در يك دوره از جدول از چپ به راست با زياد شدن باد مثبت هسته اتم، شعاع اتمي کاهش مي‌يابد. شكل زير تغييرات شعاع اتمي عناصر را بر حسب عدد اتمي نشان مي‌دهد.



تغییرات شعاع اتمی در عناصر واسطه خیلی جزئی است زیرا
الکترون آخر در این عناصر وارد لایه‌های داخلی می‌شود و این
الکترون‌ها نمی‌گذارند بار کامل هسته روی الکترون‌های لایه آخر
اعمال گردد (پوشش دهندگی بار هسته)

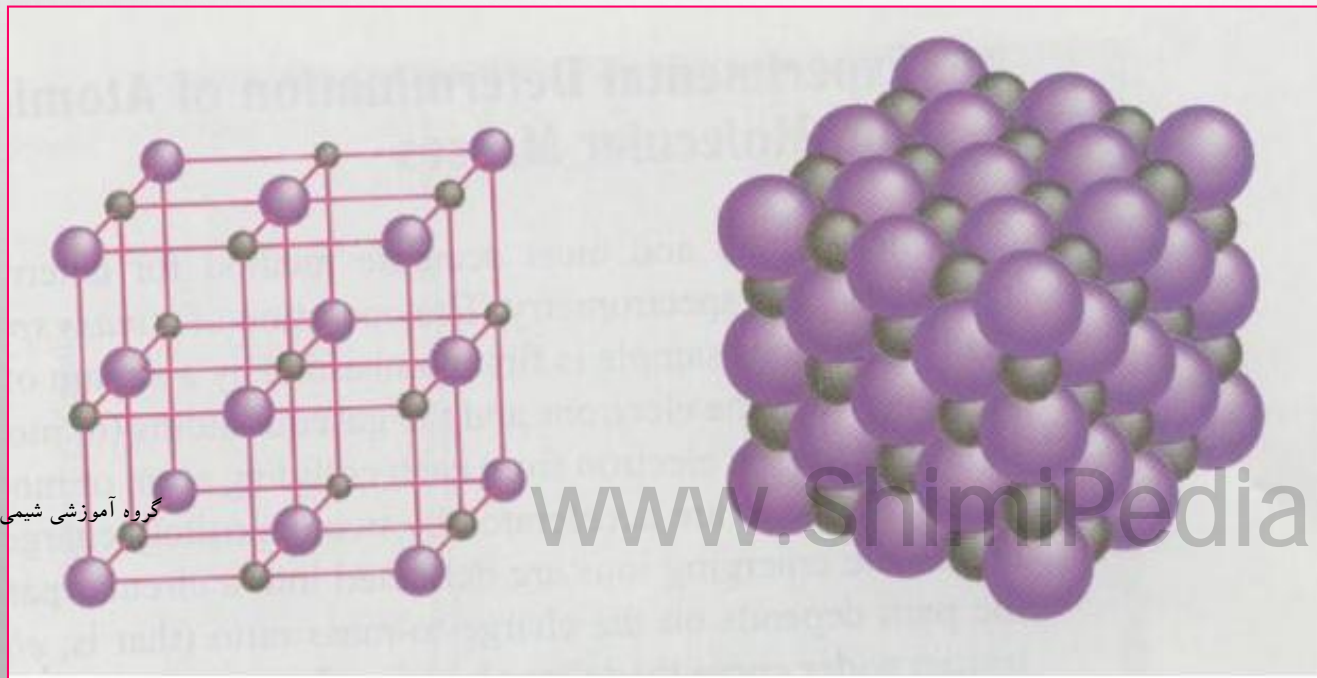
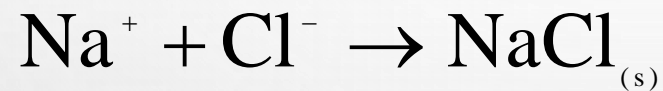
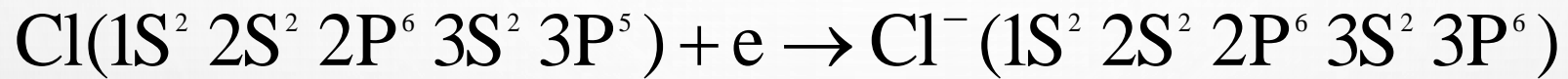
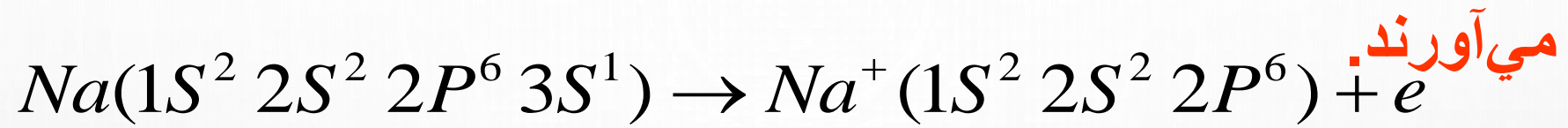
کاهش شعاع اتم در لانتانیدها را انقباض لانتانیدی می‌گوئیم. در این عناصر
الکترون آخر وارد لایه $4f$ می‌شود و این الکترون‌ها نقش پوشش
دهندگی خوبی را برای الکترون‌های لایه $6s$ ایفا نمی‌کنند.

پیوند یونی

برای درک بهتر پیوند یونی، تشکیل این پیوند را بین سدیم و کلر در نظر می‌گیریم.

در ابتدا اتم سدیم تصعید شده و به بخار سدیم تبدیل می‌گردد سپس یک الکترون از دست می‌دهد و به یون سدیم تبدیل می‌گردد. همزمان با این واکنش‌ها پیوند بین دو اتم کلر در مولکول کلر می‌شکند و اتم کلر الکترون سدیم را گرفته و به یون کلرید تبدیل می‌گردد.

حال این دو یون تحت تاثیر جاذبه بین بار مثبت و بار منفی در کنار یکدیگر قرار گرفته و کلرید سدیم جامد را بوجود



شبکه بلوری NaCl

در شکل روبرو

مشاهده می گردد.

چند نکته در مورد پیوند یونی:

الف) پیوند یونی بین يك فلز و يك غير فلز فعال به وجود مي آید.

ب) تعداد كل الكترونهايي كه فلز از دست مي دهد بايد با تعداد كل الكترونهايي كه غير فلز مي گيرد برابر باشد. بنابراین از ترکیب سدیم و آهن (III) با اکسیژن به ترتیب Na_2O و Fe_2O_3 تشکیل مي گردد.

ج) ترکیبات یونی فقط در حالت گازی از يك جفت یون تشکیل شده اند ولي در حالت جامد کاتیونها و آنیونها آرایش منظمي به خود مي گیرند كه حالت بلوري نامیده مي شود.

د) فلزات در واکنش‌های یونی به نحوی الکترون از دست می‌دهند که به آرایش گاز نجیب برسند ولی بعضی از فلزات مثل روی اگر بخواهند به آرایش گاز نجیب برسند باید دوازده الکترون از دست بدهد اما کندن این تعداد الکترون نیاز به انرژی زیادی دارد در عوض روی دو الکترون از دست می‌دهد و به آرایش نسبتاً پایدار ($3S^2 3P^6 3D^{10}$) دست می‌دهد و Zn^{2+} تبدیل می‌گردد.



سایر آرایش‌های الکترونی پایدار یونها در جدول زیر آمده است

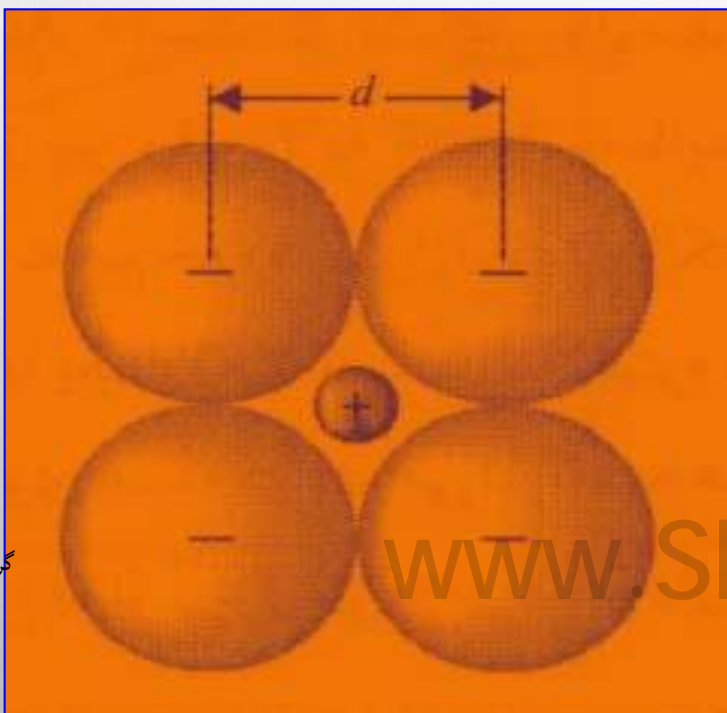
موارد دیگر	۱۸+۲ [[n-۱)s ² (n-۱)p ⁶ (n-۱)d ¹⁰ ns ²]	۱۸ [ns ² np ⁶ nd ¹⁰]	آرایش هشت تایی [ns ² np ⁶]
Cr ^{۲+} [Ar]۳d ⁴	In ⁺	Cu ⁺ Zn ^{۲+}	Na ⁺ Mg ^{۲+}
Cr ^{۳+} [Ar]۳d ³	Tl ⁺	Ag ⁺ Cd ^{۲+}	K ⁺ Ca ^{۲+}
Mn ^{۲+} [Ar]۳d ⁵	Sn ^{۲+}	Au ⁺ Hg ^{۲+}	Rb ⁺ Sr ^{۲+}
Mn ^{۳+} [Ar]۳d ⁴	Pb ^{۲+}	Ga ^{۳+}	Cs ⁺ Ba ^{۲+}
Fe ^{۲+} [Ar]۳d ⁶	Sb ^{۳+}	In ^{۳+}	Fr ⁺ Ra ^{۲+}
Fe ^{۳+} [Ar]۳d ⁵	Bi ^{۳+}	Tl ^{۳+}	Al ^{۳+}
Co ^{۲+} [Ar]۳d ⁷			Sc ^{۳+}
Co ^{۳+} [Ar]۳d ⁶			Y ^{۳+}
Ni ^{۲+} [Ar]۳d ⁸			La ^{۳+}
Ni ^{۳+} [Ar]۳d ⁷			

انرژی شبکه

انرژی شبکه: انرژی مبادله شده در هنگام تشکیل بلور از یونهای مثبت و منفی گازی را انرژی شبکه می‌گوئیم. در این مرحله انرژی زیادی آزاد خواهد شد. میزان انرژی شبکه به بار یونها و شعاع آنها بستگی دارد. هر چه بار یونها بیشتر و شعاع یونها کمتر باشد انرژی شبکه بیشتر است. به عنوان مثال انرژی شبکه MgO (-948 Kcal/mol) از انرژی شبکه NaCl (-948 Kcal/mol) بیشتر می‌باشد.

شعاع یونی

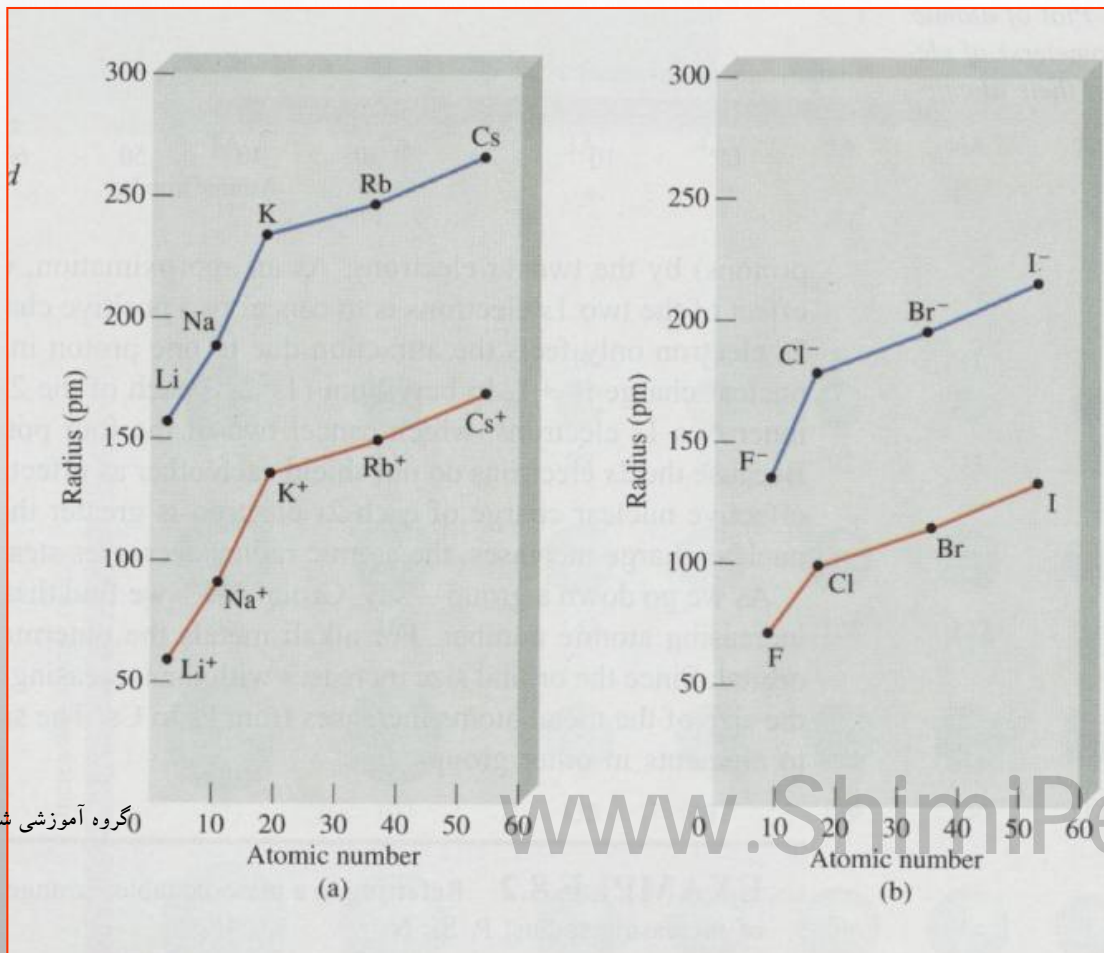
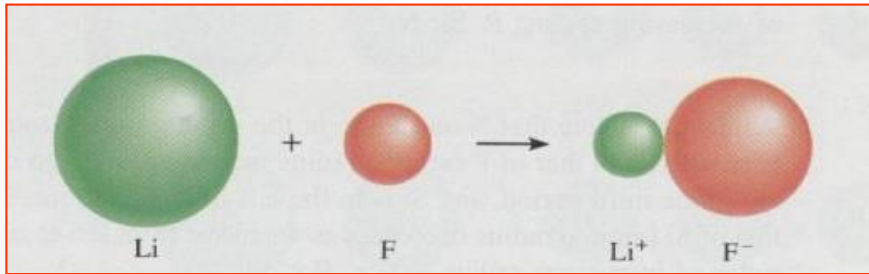
با استفاده از پراش اشعه X می‌توانیم فاصله مراکز دو یون را بدست آوریم. در بلور یدید لیتیم بدلیل کوچک بودن کاتیون، آنیونهای یدید به یکدیگر تماس می‌باشند که با استفاده از پراش اشعه X فاصله بین مراکز دو یون یدید را بدست می‌آوریم.



نصف این فاصله شعاع یون یدید را به ما می‌دهد. حال یون یدید را مبنا گرفته و شعاع یونهای دیگر را نسبت به آن می‌سنجیم.

شعاع کاتیونها از شعاع فلز مربوطه کمتر و شعاع آنیون از شعاع

غیر فلز مربوطه بیشتر می‌باشد.



تغییرات شعاع اتمی و یونی فلزات قلیائی و هالوژن‌ها نسبت به عدد اتمی در شکل روبرو مشاهده می‌گردد.

پیوند کووالانسی

در حالتی که دو اتم متصل شده یکسان باشند، امکان انتقال الکترون از يك اتم به اتم دیگر و جود ندارد. در این حالت دو اتم يك یا چند الکترون را بین خود به اشتراك می گذارند و به آرایش گاز نجیب می رسند. الکترونهاي مشترك براي هر دو اتم در نظر گرفته می شوند. تشکیل پیوند کووالانسی به روش لوئیس یا الکترون نقطه‌ای در زیر نمایش داده شده است.

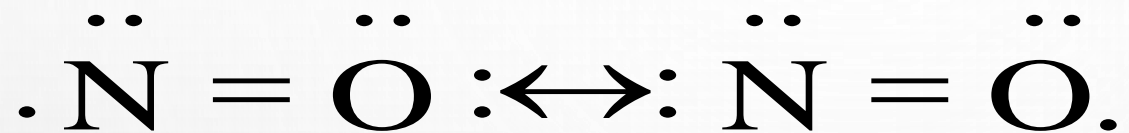


قاعده هشتائی در مورد عناصر دوره دوم جدول تناوبی صدق می‌کند و برای این عناصر تعداد پیوندهای کووالانسی برابر است با تعداد اربیتالهای نیمه پر آن عنصر.

موارد استثناء از قاعده هشتائی

الف) اگر اتم مرکزی از تناوب سوم به بعد باشد؛ می‌تواند در اطراف اتم مرکزی بیش از هشت الکترون قرار گیرد. مثلاً در اطراف اتم فسفر در PCl_5 ، ده الکترون قرار دارد یا در اطراف گوگرد در SF_6 دوازده الکترون قرار دارد زیرا این اتمها می‌توانند از لایه **D** خود نیز در تشکیل پیوند استفاده نمایند.

ب) مولکولهایی که مجموع تعداد الکترونهاي ظرفیت آنها فرد است، از قاعده هشتائی پیروي نمیکنند مثل مولکول NO .



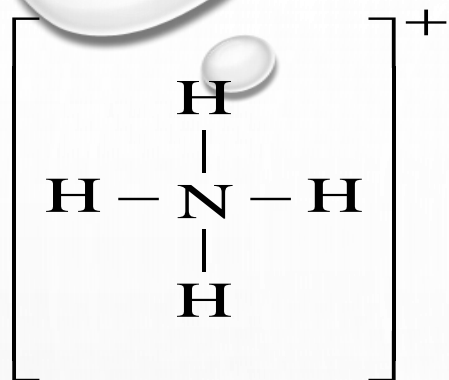
ج) مولکولهایی که دارای کمبود الکترون میباشند نیز از قاعده هشتائی پیروي نمیکنند مثل مولکول BF_3 .



بار قراردادي

در بحث قبلي عنوان شد كه تعداد پيوند كووالانسي كه يك اتم تشكيل مي‌دهد با تعداد اربیتال نيمه پر آن اتم برابر است، حال سؤال اين است كه چطور نيتروژن كه داراي سه اربیتال نيمه پر مي‌باشد در تركيب NH_4^+ چهار پيوند كووالانسي تشكيل داده است؟

براي پاسخ دادن به اين سؤال از بحث بار قراردادي استفاده مي‌نمائيم و بار قراردادي نيتروژن را در يون NH_4^+ مطابق فرمول زير تعيين مي‌كنيم.



بار قراردادی نیتروژن در یون NH_4^+ مطابق
فرمول زیر تعیین می شود.

$$\text{بار قراردادی N در } \text{NH}_4^+ = \text{ظرفیت اتم N} - \frac{\text{تعداد الکترون پیوندی اطراف N}}{2} - \text{تعداد الکترون ناپیوندی اطراف N}$$

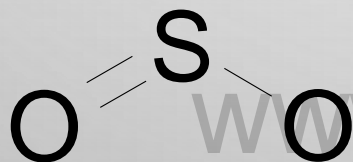
$$\text{بار قراردادی N در } \text{NH}_4^+ = 5 - \frac{8}{2} - 0 = 1$$

بار قراردادی N در NH_4^+ یک می باشد و مثل این است که یک
الکترون از دست داده است، در این حالت تعداد اربیتالهای نیمه پر
نیتروژن به چهار می رسد و این اتم می تواند چهار پیوند تشکیل بدهد.

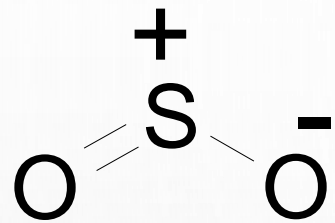
نکته: مجموع بار قراردادی کلیه اتمهای یک گونه شیمیایی با بار آن گونه برابر می‌باشد.

مثال: ساختار لوئیس و بار قراردادی کلیه اتمها را در مولکول SO_2 مشخص نمایید.

این مولکول دارای 18 الکترون ظرفیت و دارای ساختار زاویه‌دار می‌باشد. این 18 الکترون باید به گونه‌ای بین اتمها توزیع گردد که همه به آرایش هشتائی برسند پس باید یکی از پیوندهای موجود بین O و S دوگانه باشد یعنی به صورت زیر:



بار قراردادي اتمهای اکسیژن و گوگرد را محاسبه کرده و روی این اتمها
قرار می دهیم .

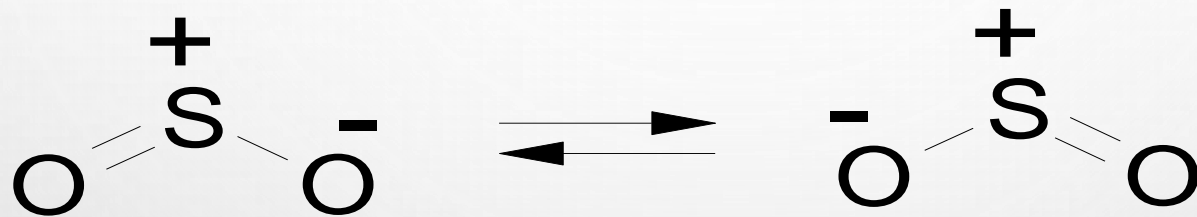


این ساختار داراي دو اشکال مي باشد:

الف) طول يکي از پیوندها از دیگری کوتاهتر مي باشد در حالي که در ساختار واقعي طول هر دو پیوند
یکسان مي باشد.

ب) در این شکل يکي از اتمهاي اکسیژن منفي و دیگری بدون بار است در حالي که در ساختار واقعي هر
دو اتم به يك نسبت داراي بار منفي مي باشند.

برای رفع مشکل برای نمایش مولکول SO_2 باید ترکیبی از دو یا چند ساختار بکار ببریم که به آنها شکل‌های رزونانسی می‌گوئیم و مولکول SO_2 هیبریدی رزونانسی از این ساختارها می‌باشد.



مثال دیگر مولکول دی‌نیتروژن اکسید N_2O می‌باشد که دارای شکل‌های رزونانسی زیر است.



تئوري اربیتال مولکولي

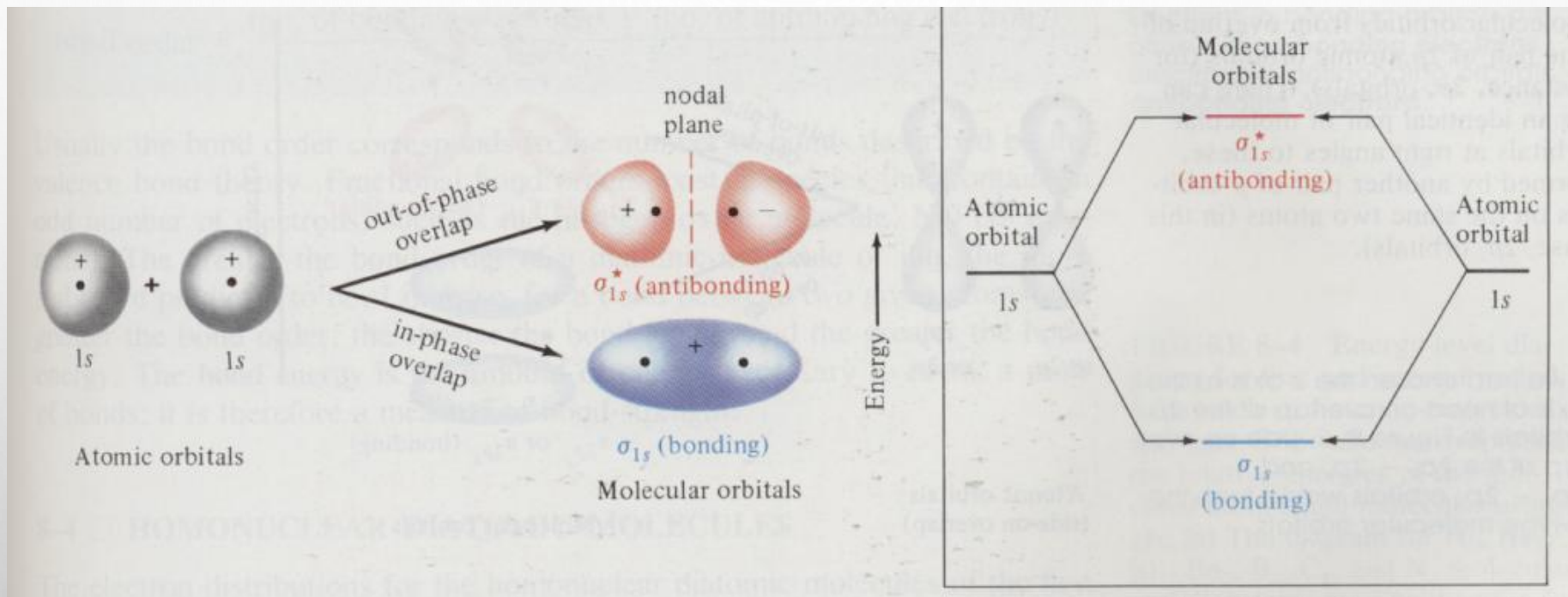
طبق این تئوري، هنگامي که دو اتم براي تشکیل پیوند به یکدیگر نزدیک می‌شوند، توابع موج

اربیتالهاي اتمي آنها با یکدیگر ترکیب شده و توابع موجي **جديدي** که همان اربیتالهاي

مولکولي هستند؛ حاصل می‌گردند پس؛ الکترونهاي دو اتم به ترتیب افزایش انرژی در این

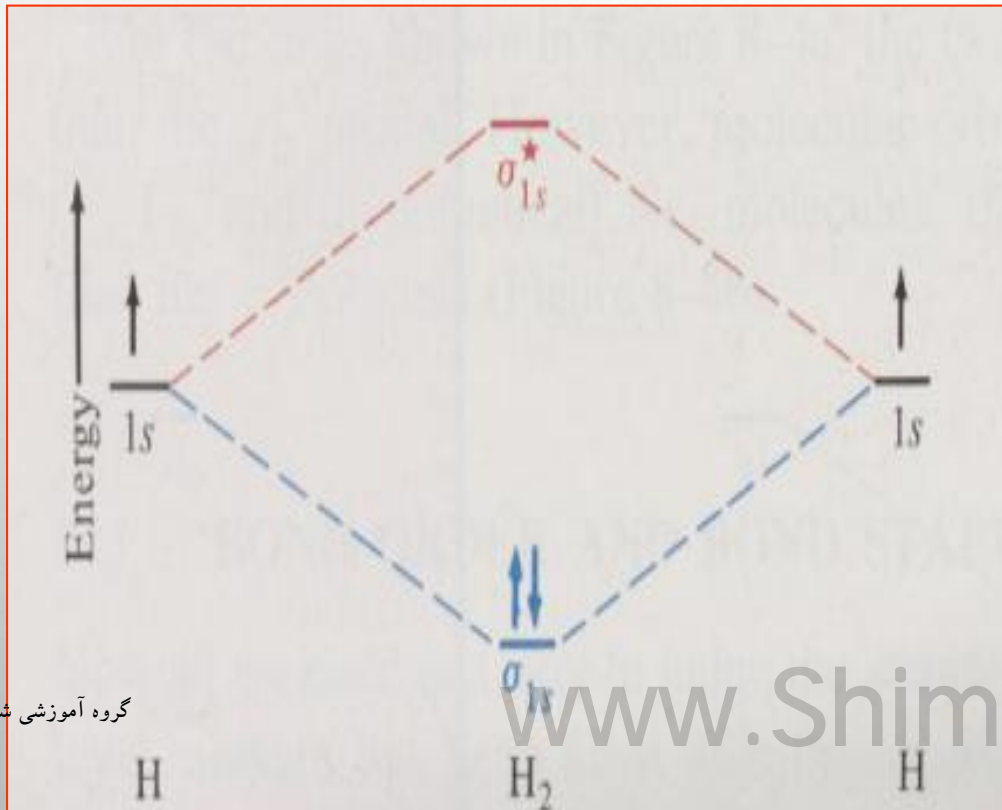
اربیتالها قرار می‌گیرند.

تشکیل اربیتالهای مولکولی از ترکیب شدن دو اربیتال $1s$ در زیر نشان داده شده است.



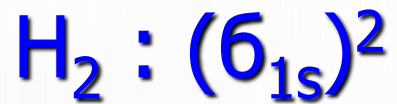
بعنوان مثال تشکیل پیوند بین دو اتم هیدروژن را به روش اربیتال

از ترکیب شدن دو اربیتال $1s$ با یکدیگر دو اربیتال مولکولی حاصل می‌گردد. یکی از آنها سطح انرژی پائین‌تری نسبت به اربیتالهای $1s$ دارد که به آن اربیتال مولکولی پیوندی σ_{1s} می‌گوئیم و دیگری سطح انرژی بالاتری نسبت به اربیتالهای $1s$ دارد که به آن اربیتال مولکولی ضد پیوندی σ_{1s}^* می‌گوئیم.



سپس دو الکترون وارد پائین‌ترین اربیتال مولکولی می‌شود و پیوند بین دو اتم هیدروژن برقرار می‌گیرد. تشکیل پیوند بین دو اتم هیدروژن در شکل روبرو نشان داده شده است.

ساختار الکترونی مولکول H_2 را بصورت زیر نشان می‌دهیم.



برای محاسبه میزان قدرت پیوند بین دو اتم می‌توانیم از مرتبه پیوند استفاده نماییم. مرتبه پیوند صفر نشان دهنده این است که امکان تشکیل پیوند بین دو اتم وجود ندارد و هر چه مرتبه پیوند عدد بزرگتری باشد نشان دهنده این است که پیوند بی دو اتم قویتر می‌باشد.

$$\text{تعداد الکترون ضد پیوندی} - \text{تعداد الکترون پیوندی} = \text{مرتبه پیوند } H_2$$

2

$$H_2 \text{ مرتبه پیوند} = \frac{2-0}{2} = 1$$

آیا امکان تشکیل مولکول He_2 وجود دارد یا خیر؟

هلیوم در لایه ظرفیت خود دو الکترون در اربیتال $1s$ دارد و در هنگام تشکیل پیوند بین دو اتم هلیوم از ترکیب شدن دو اربیتال $1s$ دو اربیتال Σ_{1s} و Σ_{1s}^* تشکیل می‌گردد. سپس چهار الکترون مولکول فرضی بصورت زیر در این اربیتالها قرار می‌گیرند.

ساختار الکترونی He_2 : $(\delta_{1s})^2 (\delta_{1s}^*)^2$

$$\text{He}_2 \text{ مرتبه پیوند} = \frac{2 - 2}{2} = 0$$

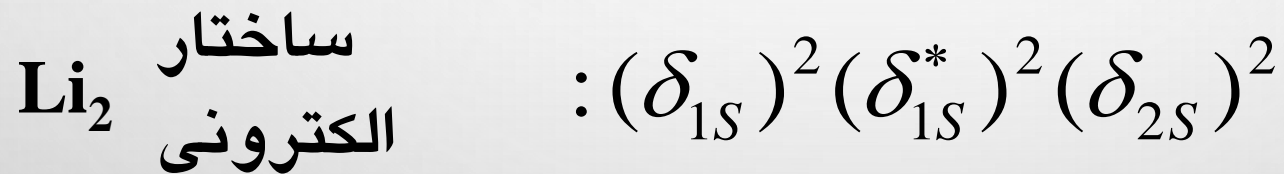
چون مرتبه پیوند He_2 صفر شد پس امکان تشکیل چنین مولکولی وجود

www.ShimiPedia.ir

ندارد.

آیا امکان تشکیل مولکول Li_2 وجود دارد یا خیر؟

هنگامی که دو اتم لیتیم برای تشکیل پیوند به یکدیگر نزدیک می‌شوند، توابع موج اربیتالهای $1s$ آنها با یکدیگر و توابع موج اربیتالهای $2s$ آنها با یکدیگر ترکیب شده و اربیتالهای مولکولی حاصل می‌گردند سپس؛ الکترونهای دو اتم به ترتیب افزایش انرژی در این اربیتالها قرار می‌گیرند.



$$\text{مرتبۀ پیوندی Li} = \frac{4 - 2}{2} = 1$$

چون مرتبه پیوند یک می‌باشد، امکان تشکیل این مولکول وجود دارد و یک

پیوند بین دو اتم تشکیل می‌گردد.

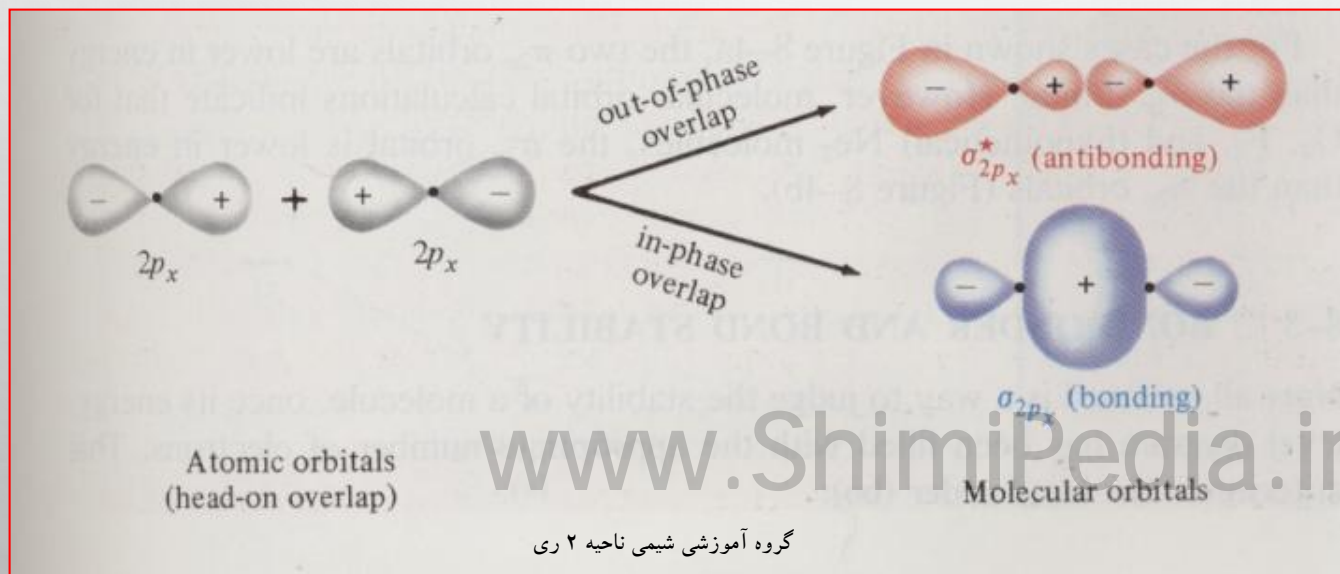
چون لایه درونی 1s و اوربیتالهای حاصل از آن کاملاً پر می‌باشند می‌توانیم از نشانه لایه اول یعنی K در نشان دادن ساختار الکترونی بصورت زیر استفاده کنیم.



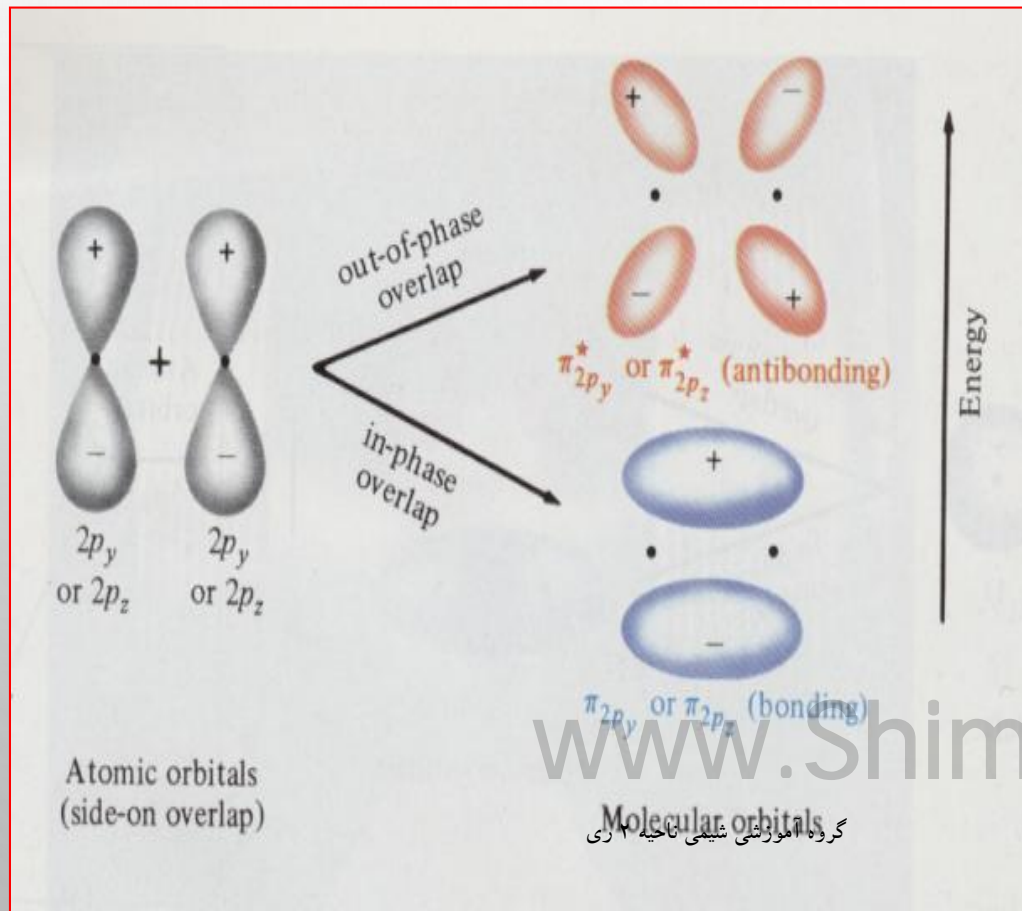
مثال: تشکیل پیوند بین دو اتم بور را طبق تئوری اربیتال مولکولی بررسی نمائید.

اتم بور در لایه ظرفیت خود سه الکترون دارد که یکی از آنها در اربیتال 2p می‌باشد. حال سوال این است که در تشکیل پیوند بین دو اتم بور اربیتالهای p چگونه با یکدیگر ترکیب می‌گردند؟

همانطور که می‌دانیم در لایه فرعی P سه اوربیتال دمبلی شکل داریم که هر یک در راستای یکی از محورهای مختصات قرار دارد. حال در نظر می‌گیریم که دو اتم بور در راستای محور X به یکدیگر نزدیک می‌گردند در نتیجه این نزدیکی، دو اوربیتال به صورت محوری با یکدیگر تداخل می‌کنند و همانطور که در شکل مشاهده می‌گردد دو اوربیتال مولکولی σ_{2p} و σ_{2p}^* را تشکیل می‌دهد.



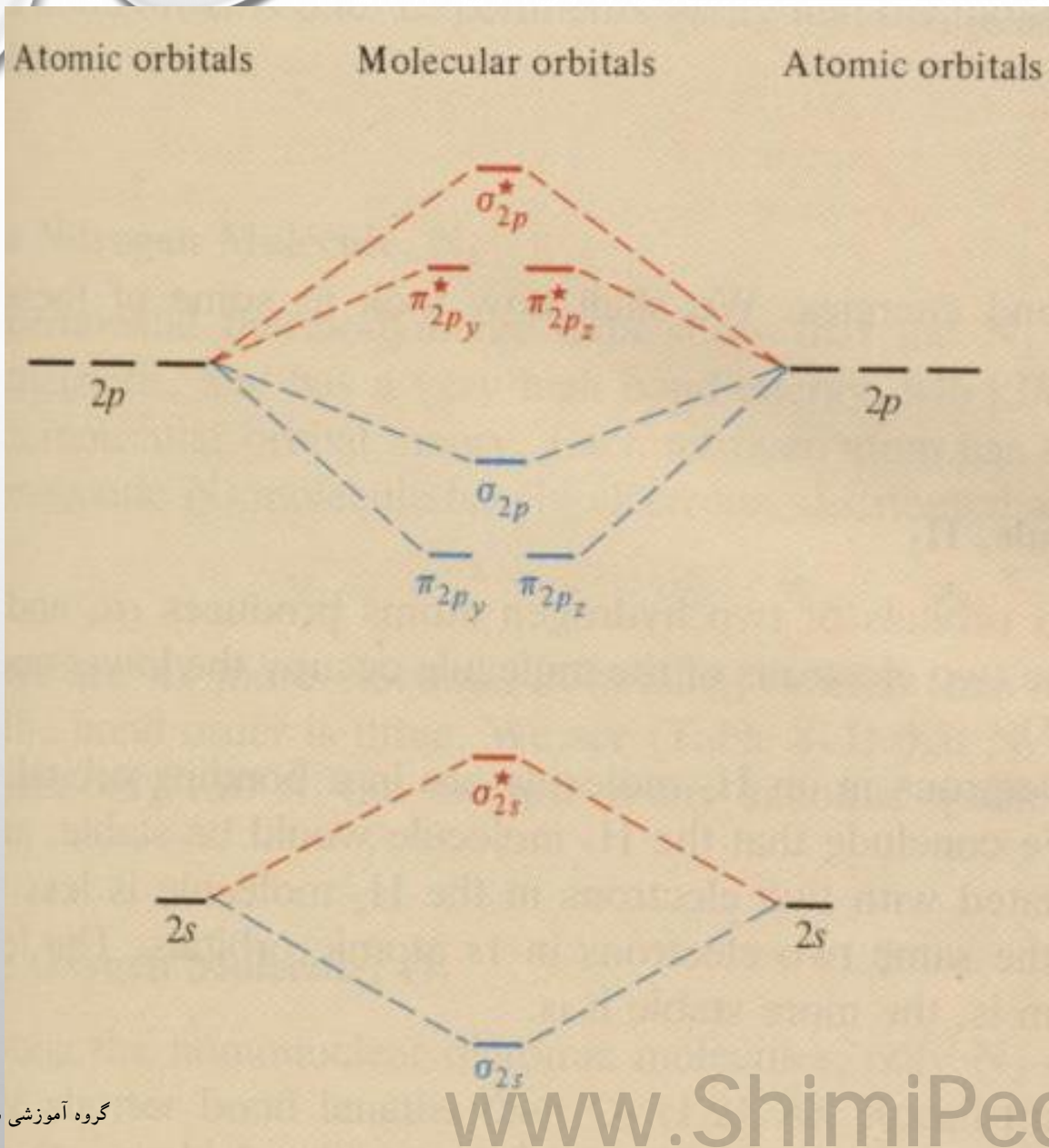
اکنون اربیتالهای P_y و P_z را در نظر می‌گیریم. هنگامی که دو اتم بور در راستای محور X به یکدیگر نزدیک می‌گردند، اربیتالهای P_y و P_z دو اتم بصورت موازی با یکدیگر قرار دارند و فقط می‌توانند از پهلو با یکدیگر تداخل کنند.



حاصل این تداخل تشکیل دو اربیتال پیوندی π_{2p_y} و π_{2p_z} و دو اربیتال ضد پیوندی $\pi_{2p_y}^*$ و $\pi_{2p_z}^*$ می‌باشد. تشکیل اربیتالهای π و π^* در شکل روبرو نشان داده شده است.

چون میزان تداخل اربیتالهای p از جهت سربه سر از میزان تداخل اربیتالهای p از پهلو بیشتر است، پس سطح انرژی σ_{2p} از π_{2p} پائین تر می باشد.

ولی در مورد مولکول B_2 باید توجه داشته باشیم که اختلاف انرژی اربیتالهای 2S و 2P در اتم بور زیاد نیست؛ بنابراین اوربیتال 2S یک اتم بور می تواند با اربیتال 2P اتم بور دیگر تداخل کند و بر عکس. در نتیجه بین الکترونهاي موجود در اربیتال Σ_{2s} و الکترونهاي موجود در Σ_{2p} دافعه الکتريکي بوجود می آید و باعث می شود که انرژی اربیتال Σ_{2s} از انرژی اربیتالهای Π_{2p} بیشتر باشد.



همین موضوع در مولکولهای N_2 و C_2 نیز وجود دارد. بنابراین ترتیب افزایش انرژی اربیتالهای مولکولی در مولکولهای N_2 و C_2, B_2, Be_2, Li_2 به صورت روبرو تغییر می‌کند.

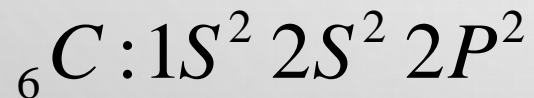
با توجه به مطالب فوق ساختار الکترونی مولکول B_2 به صورت زیر است.

$$B_2 \text{ ساختار الکترونی} = k k (\delta_{2s})^2 (\delta_{2s}^*)^2 (\pi_{2p})^1 (\pi_{2p})^1$$

$$B_2 \text{ مرتبه پیوند} = \frac{4-2}{2} = 1$$

مولکول از نظر مغناطیسی بدلیل داشتن دو الکترون منفرد، پارامغناطیس می باشد.

مثال: مولکول C_2 را از نظر تئوری اربیتال مولکولی بررسی نمائید.



مولکول C_2 دارای 8 الکترون ظرفیتی می باشد و پایدارترین ساختار

www.ShimiPedia.ir

الکترونی آن به صورت زیر است.

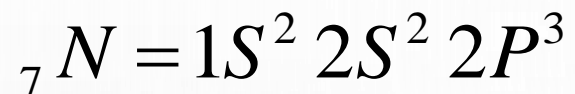
$$C_2 : k k (\delta_{2s})^2 (\delta_{2s}^*)^2 (\pi_{2p})^2 (\pi_{2p})^2$$

$$C_2 \text{ مرتبه پیوند} = \frac{6-2}{2} = 2$$

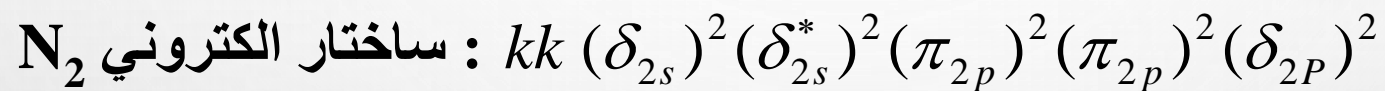
يك پیوند دو گانه بین دو اتم کربن وجود دارد. نکته غیر عادی در مورد این پیوند دوگانه این است که هر دو پیوند از نوع π می‌باشند. نکته غیر عادی دیگر این که بدلیل نزدیک بودن سطح انرژی π_{2p} به ساختار الکترونی مولکول C_2 به صورت زیر در می‌آید.

$$N_2 \text{ ساختار الکترونی} : k k (\delta_{2s})^2 (\delta_{2s}^*)^2 (\pi_{2p})^2 (\pi_{2p})^1 (\delta_{2p})^1$$

مثال: مرتبه پیوند را در مولکول N_2 محاسبه نمائید.



مولکول N_2 دارای ده الکترون ظرفیتی و دارای ساختار الکترونی زیر است.

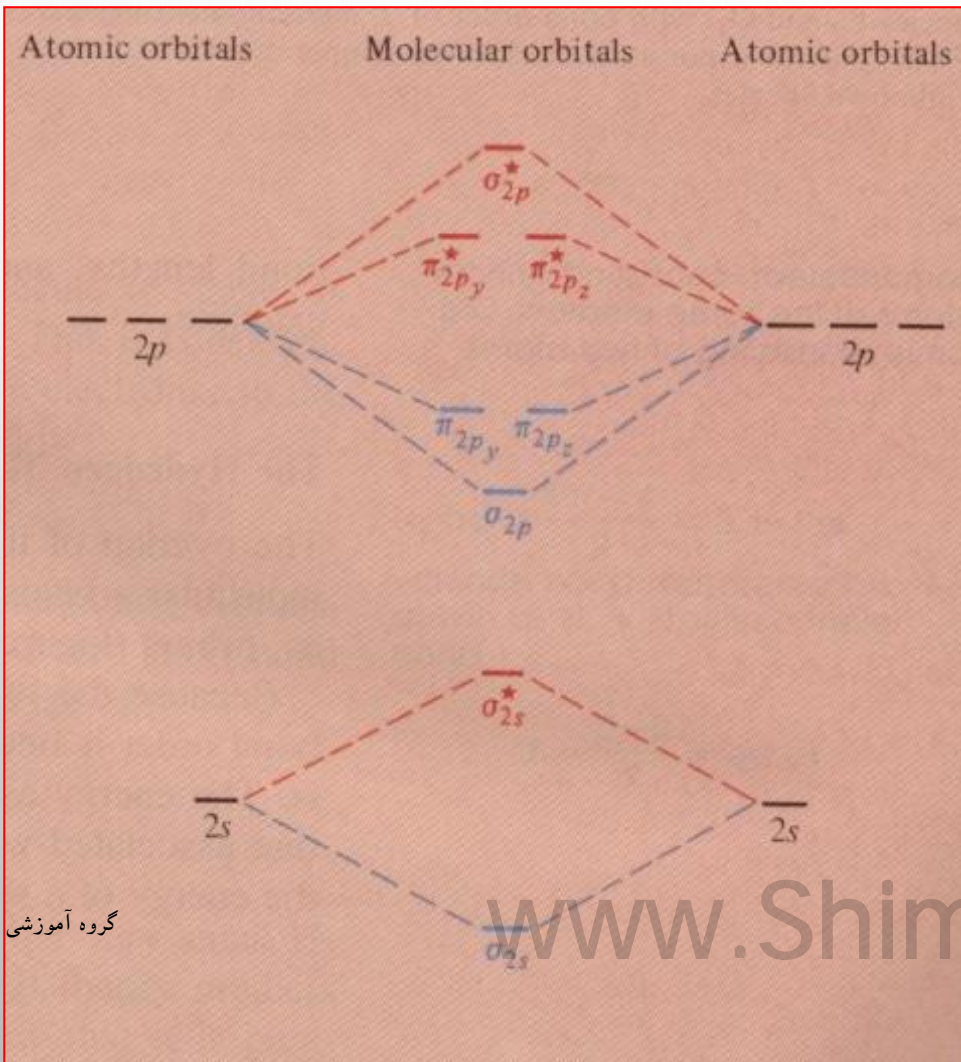
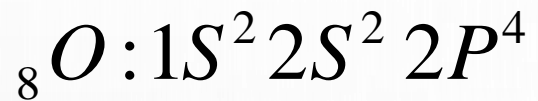


$$N_2 \text{ مرتبه پیوند} = \frac{8 - 2}{2} = 3$$

مرتبه پیوند در N_2 سه می‌باشد یعنی بین دو اتم نیتروژن یک پیوند سه

گانه وجود دارد و مولکول از نظر مغناطیسی؛ دیا مغناطیس می‌باشد.

مثال: مولکول O_2 را از نظر تئوری اربیتال مولکولی بررسی نمائید.



ترتیب افزایش انرژی اربیتالهای مولکولی در مولکولهای O_2 , F_2 و Ne_2 مطابق شکل روبرو می باشد.

مولکول O_2 دارای دوازده الکترون ظرفیتی می‌باشد و ساختار الکترونی آن به صورت زیر

$$O_2 \text{ مرتبه پیوند} = \frac{8-4}{2} = 2 \text{ می‌باشد.}$$

$$O_2 \text{ ساختار الکترونی} = kk (\delta_{2S})^2 (\delta_{2S}^*)^2 (\delta_{2P})^2 (\pi_{2P})^2 (\pi_{2P})^2 (\pi_{2P}^*)^1 (\pi_{2P}^*)^1$$

بین دو اتم اکسیژن یک پیوند دوگانه وجود دارد و مولکول پارامغناطیس

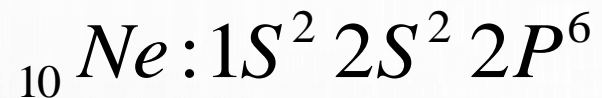
می‌باشد.

مثال: مرتبه پیوند در مولکول F_2 چند می‌باشد؟
 ${}_9F : 1S^2 2S^2 2P^5$

$$F_2 \text{ ساختار الکترونی} = kk (\delta_{2S})^2 (\delta_{2S}^*)^2 (\delta_{2P})^2 (\pi_{2P})^2 (\pi_{2P})^2 (\pi_{2P}^*)^2 (\pi_{2P}^*)^2$$

$$F_2 \text{ مرتبه پیوند} = \frac{8-6}{2} = 2$$

مثال: آیا امکان تشکیل مولکول Ne_2 وجود دارد یا خیر؟



Ne_2 ساختار الکترونی = $kk (\delta_{2S})^2 (\delta_{2S}^*)^2 (\delta_{2P})^2 (\pi_{2P})^2 (\pi_{2P})^2 (\pi_{2P}^*)^2 (\pi_{2P}^*)^2 (\delta_{2P}^*)^2$

$$Ne_2 \text{ مرتبه پیوند} = \frac{8-8}{2} = 2$$

بنابر این امکان تشکیل پیوند بین دو اتم Ne وجود ندارد.

مثال: امکان تشکیل مولکول هیدریدلیتیم را از نظر تئوری اربیتال مولکولی

بررسی نمایند.

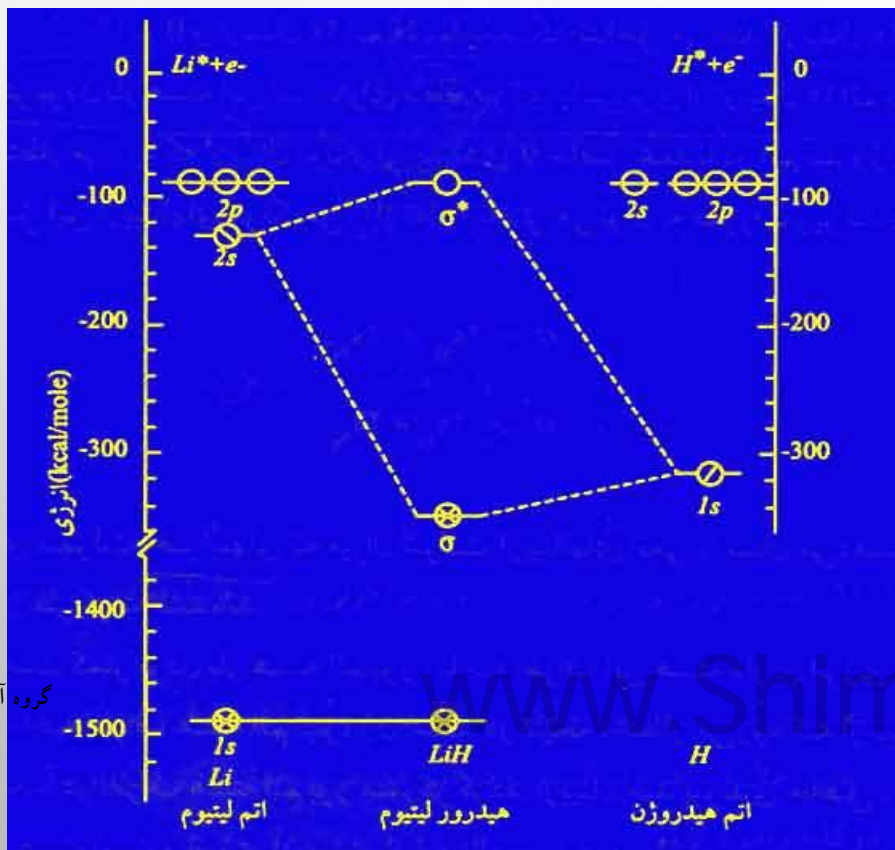
هنگامی که دو اتم هیدروژن و لیتیم به یکدیگر نزدیک می‌گردند. اربیتال‌های ظرفیتی آنها با هم ترکیب شده (1S اتم هیدروژن و 2S اتم لیتیم) و یک اربیتال مولکولی پیوندی Σ و یک اربیتال ضد پیوندی Σ^* بوجود می‌آید.

نمودار انرژی اربیتال‌های

مولکولی برای مولکول LiH

در شکل روبرو نشان داده

شده است.



$$\text{LiH مرتبه پیوند} = \frac{2}{2} = 1$$

چون الکترونگاتیوی اتم هیدروژن از اتم لیتیم بیشتر است، جفت الکترون پیوندی بیشتر در اطراف هیدروژن متمرکز است بنابراین به علت پخش نامتقارن الکترونهاي پیوندی، مولکول **LiH** قطبی می‌شود.

مثال: مولکول بورنیتريد (BN) را از نظر تئوري اربیتال مولکولي بررسی نمائيد.

اربیتالهای 2S دو اتم B و N و اربیتالهای 2P این دو اتم با یکدیگر تداخل کرده و اربیتالهای مولکولی را بوجود می‌آورند. از آنجائی که الکترونگاتیوي نیتروژن از بور زیادتر می‌باشد، الکترونهاي پیوندي بیشتر در اطراف اتم نیتروژن متمرکز می‌باشند. ساختار الکتروني BN به صورت زیر می‌باشد.

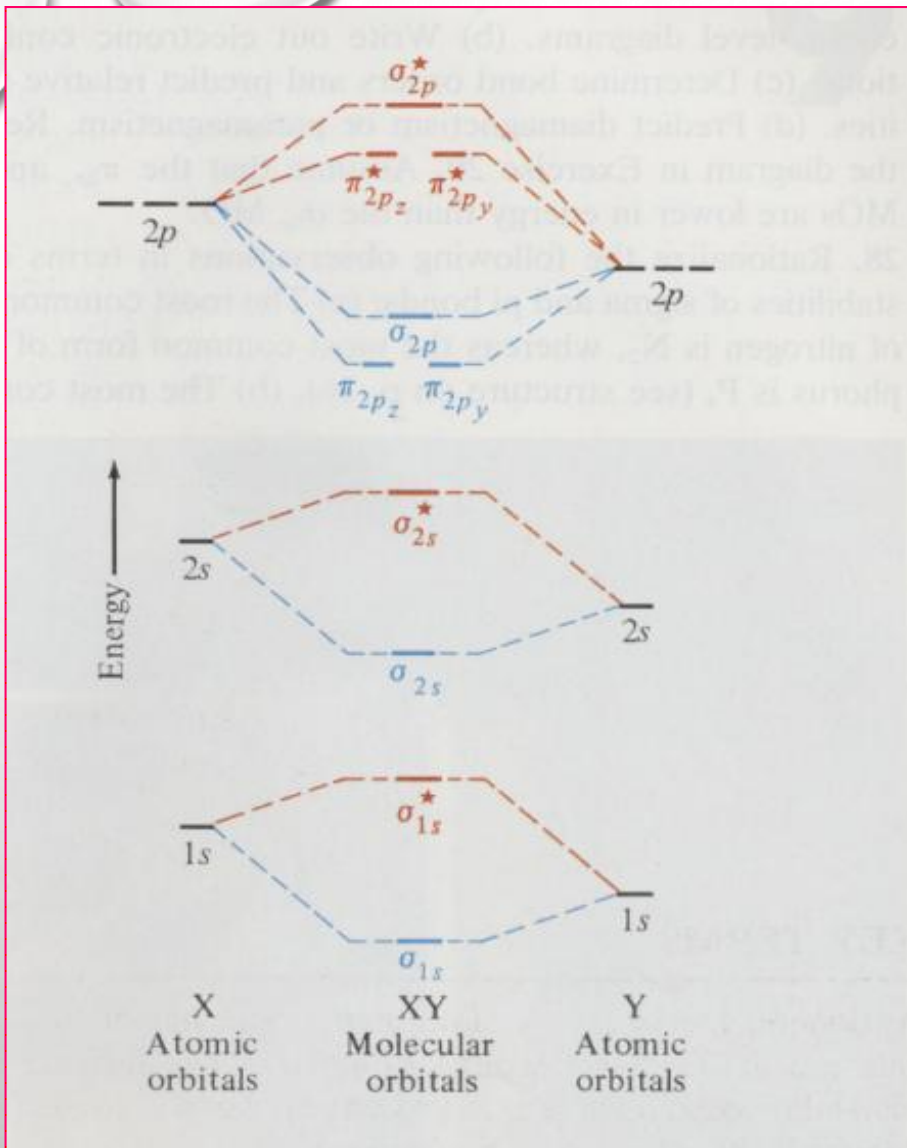
$$\text{BN ساختار الکتروني} = k k (\delta_{2S})^2 (\delta_{2S}^*)^2 (\pi_{2P})^2 (\pi_{2P})^1 (\delta_{2P})^1$$

چون سطح انرژی اربیتال σ_{2p} اختلاف زیادی با سطح انرژی اربیتال

π_{2p} ندارد، دو الکترون آخر به طور منفرد این دو اربیتال را اشغال

می‌کنند.

ترتیب افزایش سطح انرژی اربیتالهای مولکولی برای
 مولکولهای دو اتمی نا هم هسته حاصل از عناصر تناوب
 دوم جدول مانند NO , CO و CN مانند شکل زیر می باشد
 (اتم Y الکترونگاتر از X اتم می باشد).



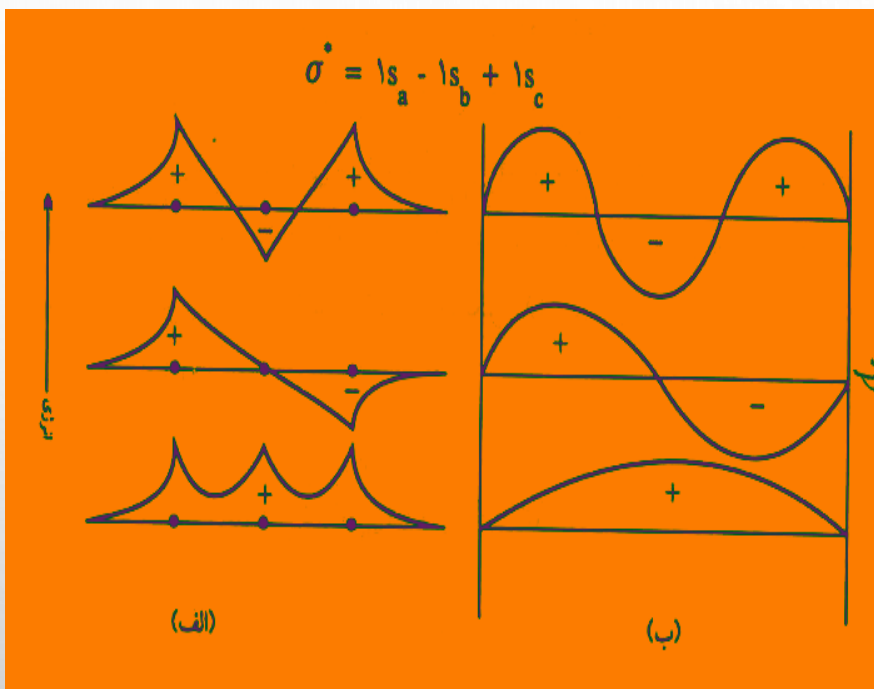
به عنوان مثال ساختار الکترونی
CO به صورت زیر می باشد.

$$CO \text{ ساختار الکترونی} = k k (\delta_{2S})^2 (\delta_{2S}^*)^2 (\pi_{2P})^2 (\pi_{2P})^2 (\delta_{2P})^2$$

اربیتالهای مولکولی چند هسته‌ای

ساده‌ترین مولکول سه اتمی مولکول H_3 می‌باشد. سه اوربیتال $1s$ سه اتم H با هم ترکیب شده و سه اوربیتال مولکولی بوجود می‌آورند. اگر هر سه اوربیتال $1s$ با علامتهای یکسان ترکیب شوند، یک اربیتال پیوندی σ تشکیل می‌شود. دومین اربیتال بین دو اتم انتهایی خاصیت ضد پیوندی و بین دو اتم مجاور خاصیت پیوندی دارد پس آنرا ضد پیوندی ضعیف در نظر می‌گیریم. سومین اربیتال مولکولی که از ترکیب اربیتالهای $1s$ با علامتهای متناوب مثبت و منفی ایجاد می‌شود، خاصیت ضد پیوندی قوی دارد.

تشکیل این سه اوربیتال در شکل زیر نشان داده شده است.



دو الکترون از سه الکترون مولکول H₃ در اوربیتال مولکولی پیوندی و الکترون سوم در اوربیتال مولکولی ضد پیوندی ضعیف قرار می‌گیرد.

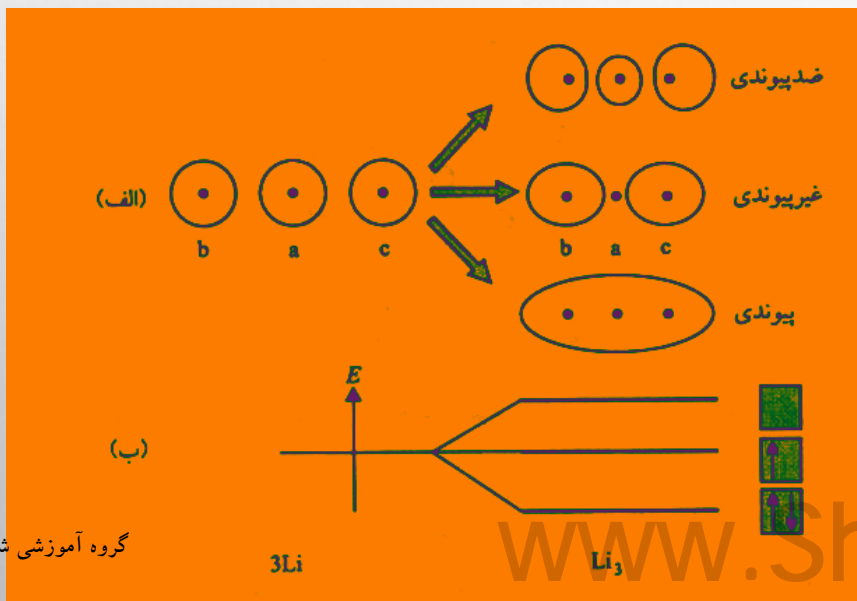
با توجه به اینکه این اوربیتال بین دو اتم انتهایی خاصیت ضد پیوندی دارد پس دو اتم انتهایی باید تا حد ممکن از یکدیگر دور قرار گیرند، به این ترتیب شکل مولکول باید خطی باشد.

پیوند فلزی

فلزات دارای دو ویژگی مهم می‌باشند. یکی اینکه انرژی یونی شدن و الکترونگاتیوی آنها پایین است دیگری اینکه تعداد الکترونهاي ظرفیتی در فلزات از تعداد اربیتالهای ظرفیتی کمتر است. پایین بودن انرژی یونی شدن و الکترونگاتیوی باعث می‌شود که الکترونهاي يك اتم فلز براحتي از اطراف هسته دور گردد و به اطراف سایر هسته‌ها برود.

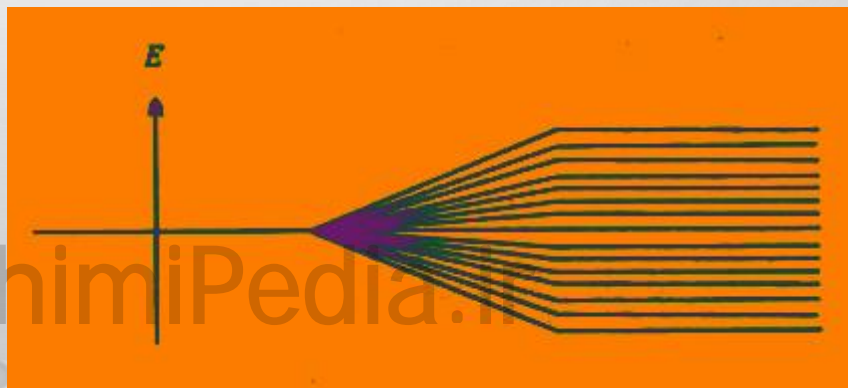
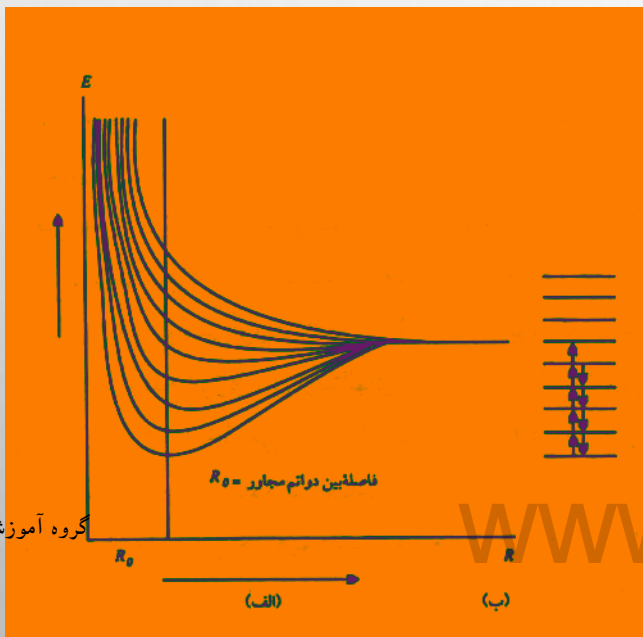
خالی بودن اکثر اربیتالهای ظرفیتی باعث می‌شود که در فاز متراکم، هر اتم بتواند از الکترونهاي متعلق به اتمهای مجاورش استفاده

حال تشکیل پیوند بین دو اتم لیتیم را در نظر می‌گیریم. از نزدیک شدن دو اتم لیتیم به یکدیگر، اربیتالهای $2S$ آنها با هم ترکیب شده و دو اربیتال مولکولی σ_{2s} و σ_{2s}^* تشکیل می‌شود پس دو الکترون ظرفیت در اربیتال پیوندی قرار می‌گیرد و مولکول Li_2 تشکیل می‌گردد.



اگر سه اتم لیتیم را به هم نزدیک کنیم سه اربیتال مولکولی پیوندی؛ غیر پیوندی و ضد پیوندی ایجاد می‌شود. تشکیل اربیتالهای مولکولی در شکل روبرو مشاهده می‌گردد.

حال اگر نه اتم لیتیم به یکدیگر نزدیک گردند، نه اربیتال مولکولی تشکیل می‌شود که مطابق شکل یک نوار انرژی تشکیل می‌دهند. وقتی فاصله هر اتم لیتیم تا اتم لیتیم مرکزی به R_0 برسد انرژی اربیتالهای مولکولی پیوندی به حداقل می‌رسد سپس نه الکترون ظرفیتی لیتیم در این اربیتالهای مولکولی قرار می‌گیرند. هر یک از این اربیتالهای مولکولی نه هسته‌ای هستند و الکترونهای پیوندی در اطراف هر نه هسته در تردد می‌باشند.



چون نصف اربیتالهای مولکولی خالی می‌باشند، الکترونهای ظرفیتی بسیار متحرک می‌باشند و بالا بودن قابلیت هدایت گرمایی و الکتریکی با توجه به این مسئله قابل توجیه می‌باشد.

به همین ترتیب از نزدیک شدن N اتم لیتیم به یکدیگر، N اربیتال مولکولی به وجود می‌آید. هر قدر تعداد اربیتالهای ترکیب شونده بیشتر باشد، اختلاف انرژی بین اربیتالهای مولکولی حاصل کمتر می‌شود. در واقع در بلور فلز، تعداد اتمها آنقدر زیاد است که باعث می‌شود اختلاف انرژی بین اربیتالهای مولکولی حاصل خیلی کم گردد و در نتیجه آن سطوح انرژی اربیتالهای

مولکولی

تشکیل

یک

نوار

انرژی

را

می‌دهند.

چون فاصله بين اربیتالهاي مولكولي حاصل كم مي‌باشد، فلزات مي‌توانند نورهاي با طول موجهاي مختلف را جذب کرده و به حالت تحريك شده در آیند و در برگشت به حالت پایه انرژی جذب شده را به صورت فوتون از دست بدهند. این مسئله باعث جلاي فلزي مي‌گردد.

مثال: تشكيل پيوند فلزي در اتمهاي برلیم را بررسی نمائید.



در بلور فلز برلیم مانند فلز لیتیم، اربیتالهاي 2s اتم Be با هم ترکیب شده و يك نوار انرژی را بوجود مي‌آورند ولي كل این نوار توسط الكترونهاي ظرفيتي برلیم پر مي‌شود وجاي خالي براي حرکت الكترونها باقي نمي‌ماند و انتظار مي‌رود كه برلیم خواص فلزي نداشته باشد در حاليكه اينطور نيست.

این مسئله به این صورت توجیه می‌شود که اربیتالهای $2p$ اتمهای برلیم نیز با یکدیگر ترکیب می‌شوند و یک نوار انرژی تشکیل می‌دهند. همانطور که در شکل زیر مشاهده می‌گردد، چون اختلاف انرژی بین اربیتالهای $2s$ و $2p$ زیاد نیست، نوارهای انرژی حاصل از اربیتالهای $2s$ و $2p$ تداخل کرده و تشکیل یک نوار انرژی واحد می‌دهند.

حال اگر N اتم برلیم به یکدیگر نزدیک گردند $4N$ اربیتال مولکولی (N اربیتال مولکولی حاصل از $2S$ و $3N$ اربیتال مولکولی حاصل از $2P$) خواهیم داشت که باید تعداد $2N$ الکترون ظرفیتی را در خود جای دهد.

سپس در نوار انرژی حاصل از همپوشانی نوارهای انرژی $2S$ و $2P$ ، $3N$ اربیتال مولکولی خالی خواهد بود و الکترونهاي ظرفیتی براحتی می‌توانند در سراسر بلور جابجا گردند سپس برلیم دارای خواص فلزی می‌باشد. این نوار انرژی (شکل زیر) که از همپوشانی نوار انرژی حاصل از $2P$ و $2S$ ایجاد می‌شود، در بلور فلز لیتیم و سایر فلزات نیز ایجاد خواهد شد.

