به نام خدا

مرکز دانلود رایگان
مهندسی متالورژی و مواد

---

www.Iran-mavad.com

فصل دوم

پیوندهای شیمیایی

گروه آموزشی شیمی ناحیه ۲ ری

انرژي تفكيك پيوند: عبارت است از ميزان انرژي لازم براي شكستن يك پيوند بين دو اتم گازي در يك مولكول گازي شكل.

$$H_{2(g)} \rightarrow 2H_{(g)} \qquad D(H-H) = \Delta H = 104 \frac{kcal}{mol}$$

انرژي تفكيك يك پيوند در درجه اول به خواص دو اتم و همچنين تا حدي به نوع ساير اتمهاي موجود در مولكول نيز بستگي دارد.

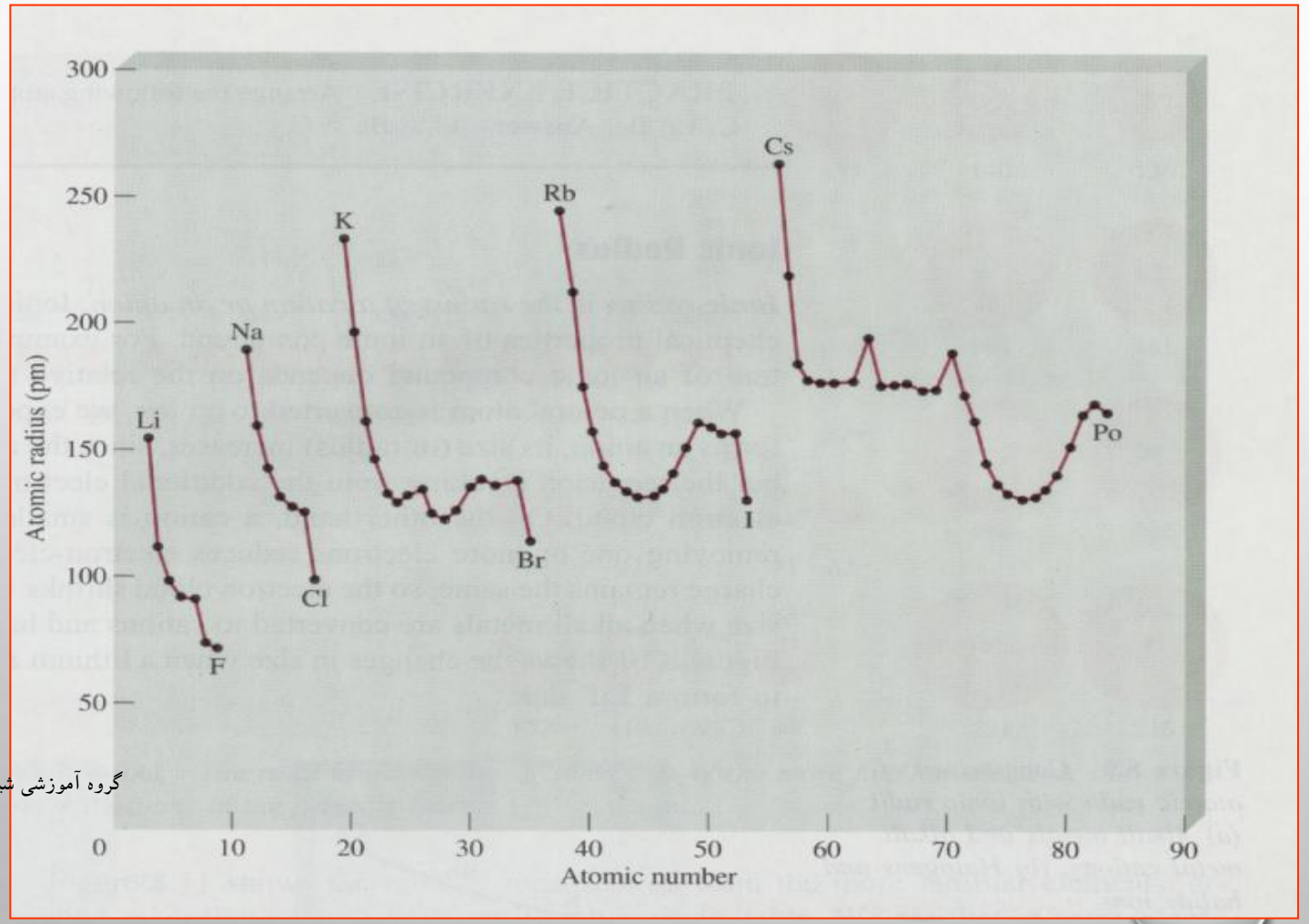
انرژي متوسط پيوند: مقدار تقريبي انرژي لازم براي شكستن يك پيوند معين در تركيبات مختلف را انرژي متوسط پيوند مي‌گوئيم.

طول پيوند: فاصله متوسطي كه بين هسته اتمهاي پيوند يافته وجود دارد را طول پيوند مي‌گوئيم.

شعاع اتمي: تعيين شعاع دقيق اتم ممكن نيست چون تعيين مكان و سرعت حركت الكترون در اطراف هسته اتم ممكن نيست ولي براي اينكه تخمين از اندازه اتم داشته باشيم از شعاع كووالانسي بجاي شعاع اتمي استفاده مي‌كنيم.

شعاع كووالانسي: نصف فاصله بين هسته دو اتمي يكسان را در يك مولكول دو اتمي، شعاع كووالانسي مي‌گوئيم.

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 كاهش مي‌يابد. شكل زير تغييرات شعاع اتمي عناصر را بر حسب عدد اتمي نشان مي‌دهد.



تغييرات شعاع اتمي در عناصر واسطه خيلي جزئي است زيرا الكترون آخر در اين عناصر وارد لايه‌هاي داخلي مي‌شود واين الكترونها نمي‌گذارند بار كامل هسته روي الكترونهاي لايه آخر اعمال گردد (پوشش دهندگي بار هسته)

كاهش شعاع اتم در لانتانيدها را انقباض لانتانيدي مي‌گوئيم. در اين عناصر الكترون آخر وارد لايه 4F مي‌شود و اين الكترونها نقش پوشش دهندگي خوبي را براي الكترونهاي لايه 6S ايفا نمي‌كنند.

پيوند يوني

براي درك بهتر پيوند يوني، تشكيل اين پيوند را بين سديم و كلر در نظر مي‌گيريم.

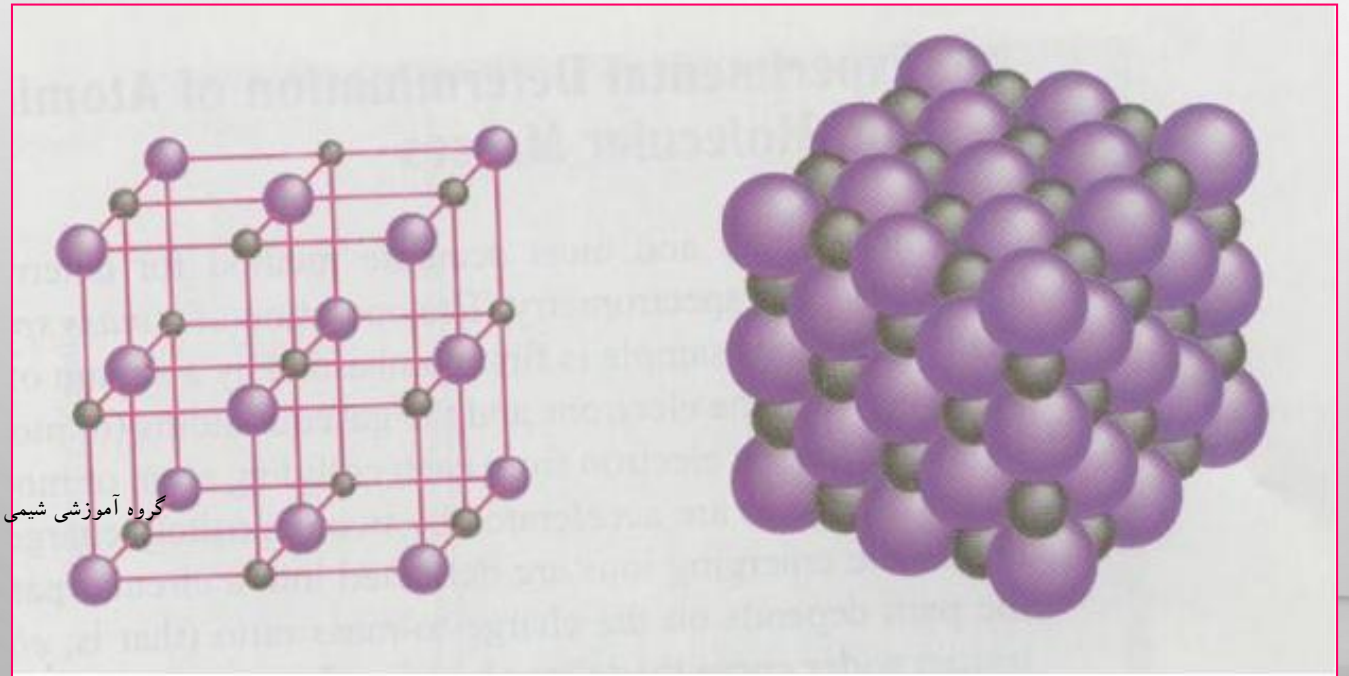
در ابتدا اتم سديم تصعيد شده و به بخار سديم تبديل مي‌گردد سپس يك الكترون از دست مي‌دهد و به يون سديم تبديل مي‌گردد. همزمان با اين واكنش‌ها پيوند بين دو اتم كلر در مولكول كلر مي‌شكند و اتم كلر الكترون سديم را گرفته و به يون كلريد تبديل مي‌گردد.

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

$$Na(1S^2\ 2S^2\ 2P^6\ 3S^1) \rightarrow Na^+(1S^2\ 2S^2\ 2P^6) + e$$

$$Cl(1S^2\ 2S^2\ 2P^6\ 3S^2\ 3P^5) + e \rightarrow Cl^-(1S^2\ 2S^2\ 2P^6\ 3S^2\ 3P^6)$$

$$Na^+ + Cl^- \rightarrow NaCl_{(s)}$$



شبکه بلوری NaCl درشکل روبرو مشاهده می گردد.

چند نكته در مورد پيوند يوني:

الف) پيوند يوني بين يك فلز و يك غير فلز فعال به وجود مي‌آيد.

ب) تعداد كل الكترونهائي كه فلز از دست مي‌دهد بايد با تعداد كل الكترونهائي كه غير فلز مي‌گيرد برابر باشد. بنابراين ازتركيب سديم و آهن (III) با اكسيژن به ترتيب NA_2O و FE_2O_3 تشكيل مي‌گردد.

ج) تركيبات يوني فقط در حالت گازي از يك جفت يون تشكيل شده‌اند ولي در حالت جامد كاتيونها و آنيونها آرايش منظمي به خود مي‌گيرند كه حالت بلوري ناميده مي‌شود.

د) فلزات در واكنش‌هاي يوني به نحوي الكترون از دست مي‌دهند كه به آرايش گاز نجيب برسند ولي بعضي از فلزات مثل روي اگر بخواهند به آرايش گاز نجيب برسند بايد دوازده الكترون از دست بدهد اما كندن اين تعداد الكترون نياز به انرژي زيادي دارد در عوض روي دو الكترون از دست مي‌دهد و به آرايش نسبتاً پايدار($3S^2\ 3P^6\ 3D^{10}$.....) تبديل می گردد(ZN^{2+}:).

$Zn: ...3s^2\ 3p^6\ 3d^{10}\ 4s^2 \rightarrow Zn: ...3s^2\ 3p^6\ 3d^{10}$

سایر آرایش‌هاي الکتروني پایدار یونها در جدول زیر آمده است

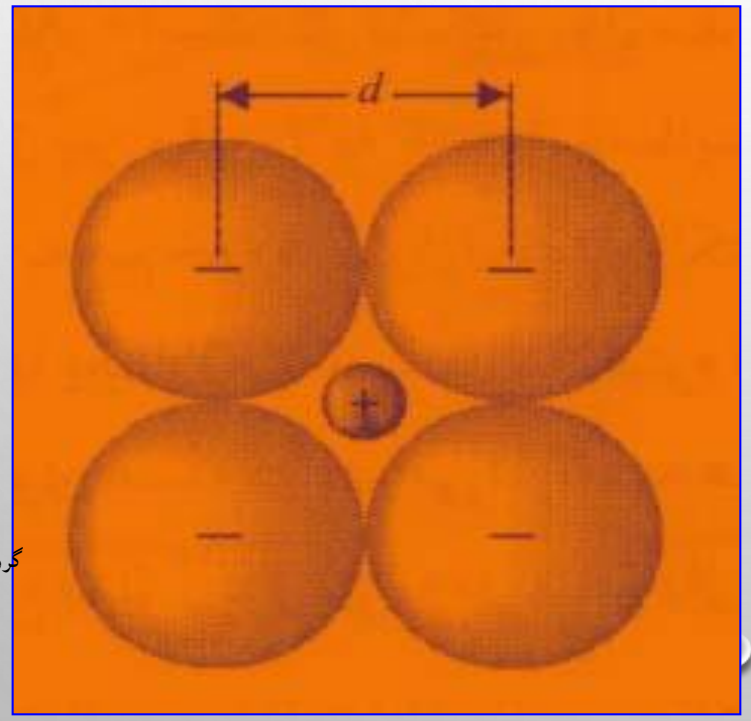
آرایش هشت تایی $[ns^2np^6]$	۱۸ $[ns^2np^6nd^{10}]$	۱۸+۲ $[(n-1)s^2(n-1)p^6(n-1)d^{10}ns^2]$	مواردديگر
Na^+ Mg^{2+}	Cu^+ Zn^{2+}	In^+	$Cr^{2+}[Ar]3d^4$
K^+ Ca^{2+}	Ag^+ Cd^{2+}	Tl^+	$Cr^{3+}[Ar]3d^3$
Rb^+ Sr^{2+}	Au^+ Hg^{2+}	Sn^{2+}	$Mn^{2+}[Ar]3d^5$
Cs^+ Ba^{2+}	Ga^{3+}	Pb^{2+}	$Mn^{3+}[Ar]3d^4$
Fr^+ Ra^{2+}	In^{3+}	Sb^{3+}	$Fe^{2+}[Ar]3d^6$
Al^{3+}	Tl^{3+}	Bi^{3+}	$Fe^{3+}[Ar]3d^5$
Sc^{3+}			$Co^{2+}[Ar]3d^7$
Y^{3+}			$Co^{3+}[Ar]3d^6$
La^{3+}			$Ni^{2+}[Ar]3d^8$
			$Ni^{3+}[Ar]3d^7$

انرژي شبكه

انرژي شبكه: انرژي مبادله شده در هنگام تشكيل بلور از يونهاي مثبت و منفي گازی را انرژي شبكه مي‌گوئيم. در اين مرحله انرژي زيادي آزاد خواهد شد. ميزان انرژي شبكه به بار يونها و شعاع آنها بستگي دارد. هر چه بار يونها بيشتر و شعاع يونها كمتر باشد انرژي شبكه بيشتر است. به عنوان مثال انرژي شبكه MgO (-948 Kcal/mol) از انرژي شبكه NaCl (-948 Kcal/mol) بيشتر می باشد.

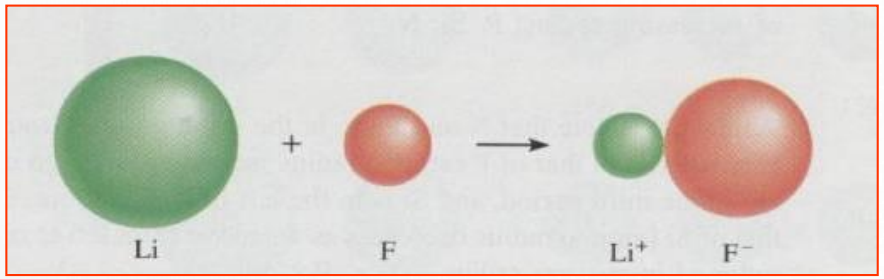
شعاع يوني

با استفاده از پراش اشعه X مي‌توانيم فاصله مراكز دو يون را بدست آوريم. در بلور يديد ليتيم بدليل كوچك بودن كاتيون، آنيونهاي يديد به يكديگر مماس مي‌باشند كه با استفاده از پراش اشعه X فاصله بين مراكز دو يون يديد را بدست مي‌آوريم.

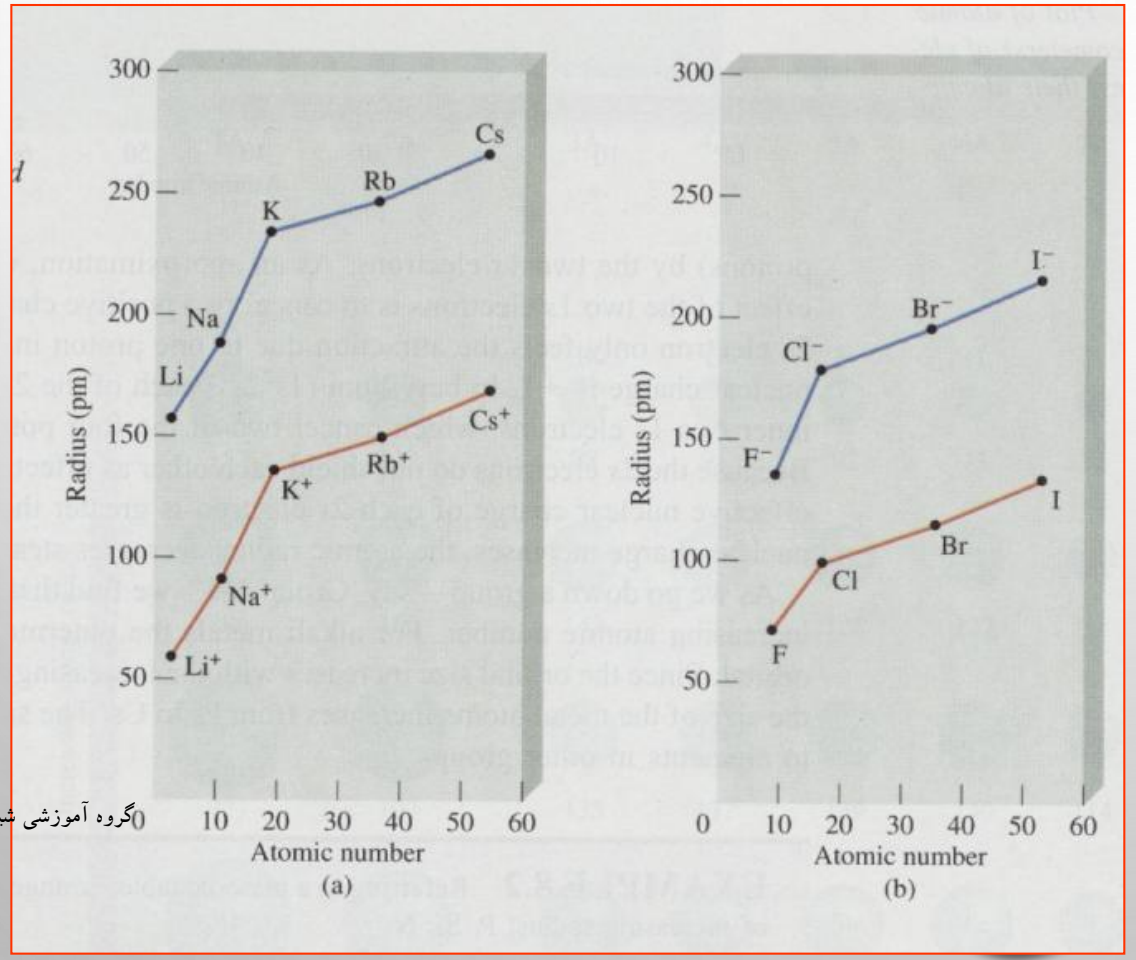


نصف اين فاصله شعاع يون يديد را به ما مي‌دهد. حال يون يديد را مبنا گرفته و شعاع يونهاي ديگر را نسبت به آن مي‌سنجيم.

شعاع کاتیونها از شعاع فلز مربوطه کمتر و شعاع آنیون از شعاع غیر فلز مربوطه بیشتر می‌باشد.

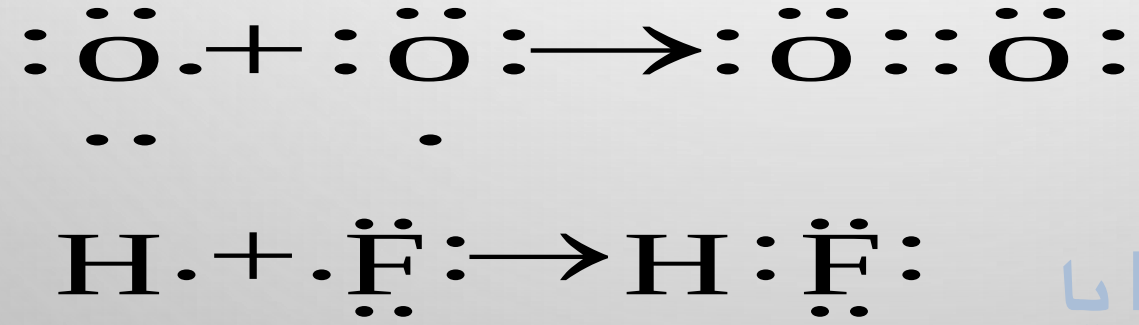


تغییرات شعاع اتمی و یونی فلزات قلیائی و هالوژنها نسبت به عدد اتمی در شکل روبرو مشاهده می‌گردد.



پيوند كووالانسی

در حالتي كه دو اتم متصل شده يكسان باشند، امكان انتقال الكترون از يك اتم به اتم ديگر و جود ندارد. در اين حالت دواتم يك يا چند الكترون را بين خود به اشتراك مي گذارند و به آرايش گاز نجيب مي‌رسند. الكترونهاي مشترك براي هر دو اتم در نظر گرفته مي شوند. تشكيل پيوند كووالانسي به روش لوئيس يا الكترون نقطه‌اي در زير نمايش داده شده است.



يا O=O

يا H-F

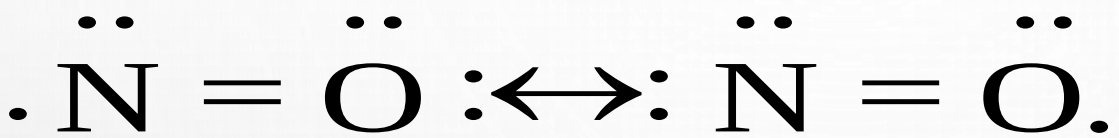
H.+.H→H:H يا H-H

قاعده هشتائي در مورد عناصر دوره دوم جدول تناوبي صدق مي‌كند و براي اين عناصر تعداد پيوندهاي كووالانسي برابر است با تعداد اربيتالهاي نيمه پر آن عنصر.

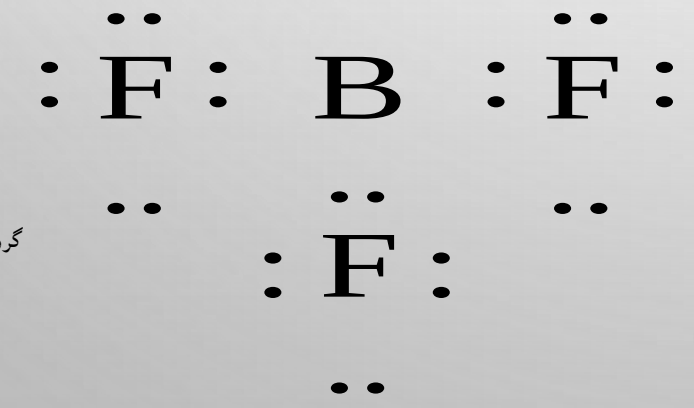
موارد استثناء از قاعده هشتائي

الف) اگر اتم مركزي از تناوب سوم به بعد باشد؛ مي‌تواند در اطراف اتم مركزي بيش ازهشت الكترون قرار گيرد. مثلاً در اطراف اتم فسفر در PCL_5، ده الكترون قرار دارد يا در اطراف گوگرد در SF_6 دوازده الكترون قرار دارد زيرا اين اتمها مي‌توانند از لايه D خود نيز در تشكيل پيوند استفاده نمايند.

ب) مولكولهائي كه مجموع تعداد الكترونهاي ظرفيت آنها فرد است، از قاعده هشتائي پيروي نمي‌كنند مثل مولكول NO .



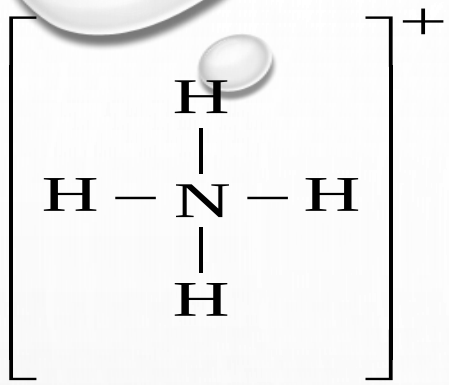
ج) مولكولهائي كه داراي كمبود الكترون مي‌باشند نيز از قاعده هشتائي پيروي نمي‌كنند مثل مولكول BF_3.



بار قراردادي

در بحث قبلي عنوان شد كه تعداد پيوند كووالانسي كه يك اتم تشكيل مي‌دهد با تعداد اربيتال نيمه پر آن اتم برابر است، حال سؤال اين است كه چطور نيتروژن كه داراي سه اربيتال نيمه پر مي‌باشد در تركيب NH^{+}_{4} چهار پيوند كووالانسي تشكيل داده است؟

براي پاسخ دادن به اين سوال از بحث بار قراردادي استفاده مي‌نمائيم و بار قراردادي نيتروژن را در يون NH^{+}_{4} مطابق فرمول زير تعيين مي‌كنيم.



بار قراردادي نيتروژن در يون NH^+_4 مطابق فرمول زير تعيين مي شود.

بار قراردادی N در NH^+_4 = N ظرفیت اتم - تعداد الکترون پیوندی اطراف N / 2 - تعداد الکترون ناپیوندی اطراف N

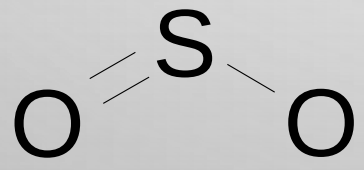
$$\text{بارقراردادي N در } NH^+_4 = 5 - \frac{8}{2} - 0 = 1$$

بار قراردادي N در NH^+_4 يك مي‌باشد و مثل اين است كه يك الكترون از دست داده است، در اين حالت تعداد اربيتالهاي نيمه پر نيتروژن به چهار مي‌رسد و اين اتم مي‌تواند چهار پيوند تشكيل بدهد.

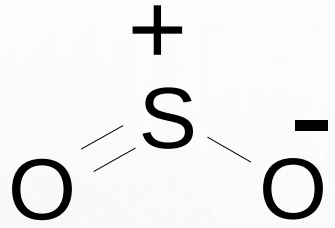
نكته: مجموع بار قراردادي كليه اتمهاي يك گونه شيميائي با بار آن گونه برابر مي‌باشد.

مثال: ساختار لوئيس و بار قراردادي كليه اتمها را در مولكول SO_2 مشخص نمائيد.

اين مولكول داراي 18 الكترون ظرفيت و داراي ساختار زاويه‌دار مي باشد. اين 18 الكترون بايد به گونه‌اي بين اتمها توزيع گردد كه همه به آرايش هشتائي برسند پس بايد يكي از پيوندهاي موجود بين O و S دوگانه باشد يعني به صورت زير:



بار قراردادي اتمهای اکسیژن و گوگردرا محاسبه کرده وروی این اتمها قرار می دهیم .

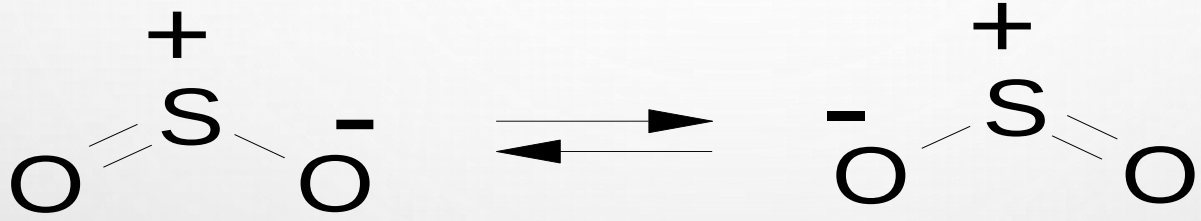


اين ساختار داراي دو اشكال مي‌باشد:

الف) طول يكي از پيوندها از ديگري كوتاهتر مي‌باشد در حالي كه در ساختار واقعي طول هر دو پيوند يكسان مي باشد.

ب) در اين شكل يكي از اتمهاي اكسيژن منفي و ديگري بدون بار است در حالي كه در ساختار واقعي هر دو اتم به يك نسبت داراي بار منفي مي‌باشند.

براي رفع مشكل براي نمايش مولكول SO_2 بايد تركيبي از دو يا چند ساختار بكار بريم كه به‌آنها شكلهاي رزونانسي مي‌گوئيم و مولكول SO_2 هيبريدي رزونانسي از اين ساختارها مي‌باشد.

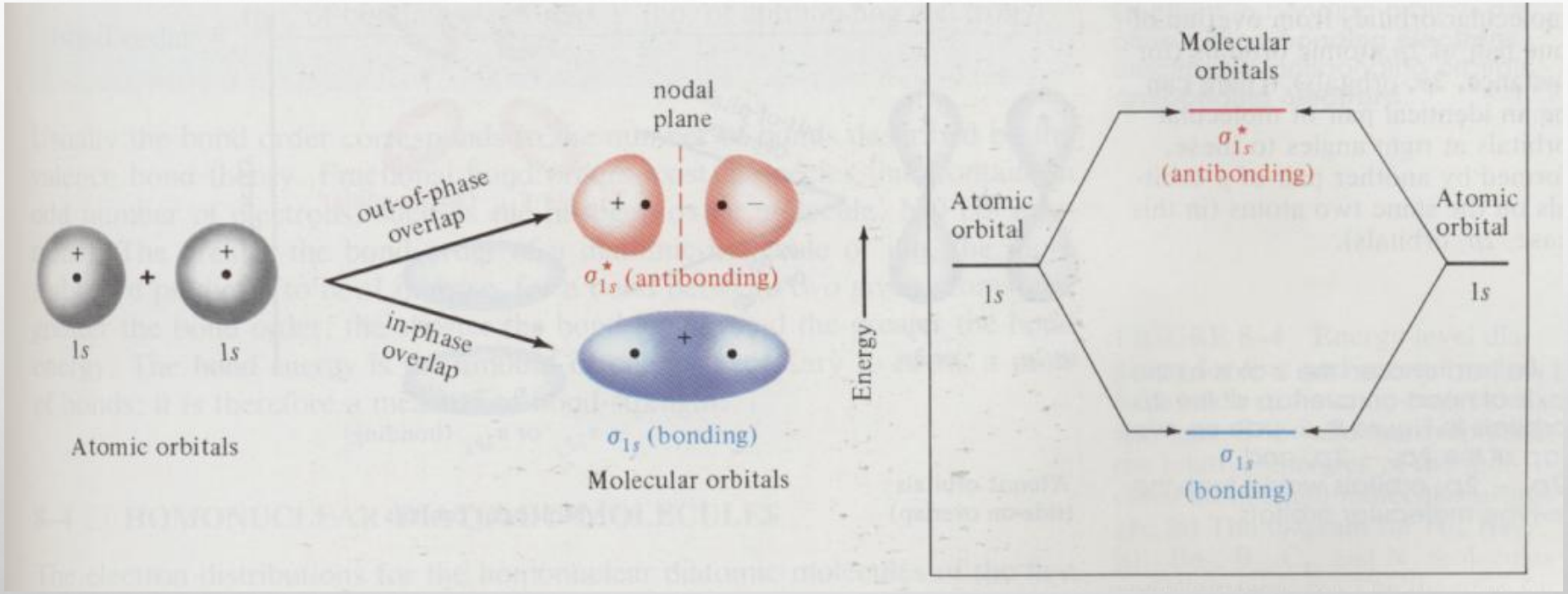


مثال ديگر مولكول دي نيتروژن اكسيد N_2O مي‌باشد كه داراي شكل‌هاي رزونانسي زير است.

تئوري اربيتال مولكولي

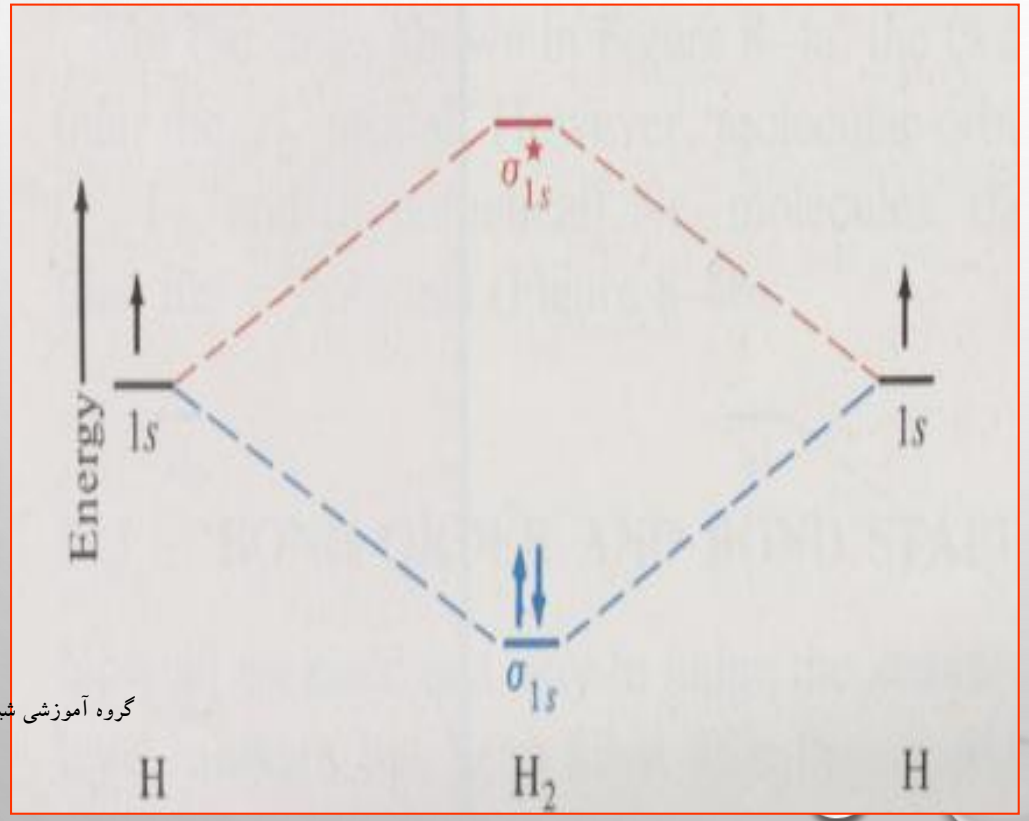
طبق اين تئوري، هنگامي كه دو اتم براي تشكيل پيوند به يكديگر نزديك مي‌شوند، توابع موج اربيتالهاي اتمي آنها با يكديگر تركيب شده و توابع موجي **جديدي** كه همان اربيتالهاي مولكولي هستند؛ حاصل مي‌گردند پس؛ الكترونهاي دو اتم به ترتيب افزايش انرژي در اين اربيتالها قرار مي‌گيرند.

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 مولکولي بررسي مي نمائيم.

از ترکیب شدن دو اربیتال 1s با یکدیگر دو اربیتال مولکولي حاصل مي‌گردد. یکي از آنها سطح انرژي پائین‌تري نسبت به اربیتالهاي 1s دارد که به آن اربیتال مولکولي پیوندي σ_{1s} مي‌گوئیم و دیگري سطح انرژي بالاتری نسبت به اربیتالهاي 1s دارد که به آن اربیتال مولکولي ضد پیوندي σ^*_{1s} مي‌گوئیم.



سپس دو الکترون H_2 وارد پائین‌ترین اربیتال مولکولي مي‌شود و پیوند بین دو اتم هیدروژن برقرار مي‌گیرد. تشکیل پیوند بین دو اتم هیدروژن در شکل روبرو نشان داده شده است.

ساختار الكتروني مولكول H_2 را بصورت زير نشان مي‌دهيم.

$$H_2 : (\sigma_{1s})^2$$

براي محاسبه ميزان قدرت پيوند بين دو اتم مي‌توانيم از مرتبه پيوند استفاده نمائيم. مرتبه پيوند صفر نشان دهنده اين است كه امكان تشكيل پيوند بين دو اتم وجود ندارد و هر چه مرتبه پيوند عدد بزرگتري باشد نشان دهنده اين است كه پيوند بي دو اتم قويتر مي باشد.

$$\text{مرتبه پيوند } H_2 = \frac{\text{تعداد الكترون ضد پيوندي - تعداد الكترون پيوندي}}{2}$$

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

آیا امکان تشکیل مولکول He_2 وجود دارد یا خیر؟

هلیم در لایه ظرفیت خود دو الکترون در اربیتال 1S دارد و در هنگام تشکیل پیوند بین دو اتم هلیم ازترکیب شدن دو اربیتال 1S دو اربیتال Σ_{1S} و Σ^*_{1S} تشکیل می گردد. سپس چهار الکترون مولکول فرضی بصورت زیر در این اربیتالها قرار می گیرند.

ساختار الکترونی He_2 : $(\delta_{1S})^2(\delta^*_{1S})$

مرتبه پیوند He_2 $= \frac{2-2}{2} = 0$

چون مرتبه پیوند He_2 صفر شد پس امکان تشکیل چنین مولکولي وجود ندارد.

آيا امكان تشكيل مولكول Li_2 وجود دارد يا خير؟

هنگامي كه دو اتم ليتيم براي تشكيل پيوند به يكديگر نزديك مي‌شوند، توابع موج اربيتالهاي 1s آنها با يكديگر و توابع موج اربيتالهاي 2s آنها با يكديگر تركيب شده و اربيتالهاي مولكولي حاصل مي‌گردند سپس؛ الكترونهاي دو اتم به ترتيب افزايش انرژي در اين اربيتالها قرار مي‌گيرند.

ساختار الكترونی Li_2 $:(\delta_{1S})^2(\delta^*_{1S})^2(\delta_{2S})^2$

مرتبه پیوند $Li_2 = \frac{4-2}{2} = 1$

چون مرتبه پيوند يك مي‌باشد، امكان تشكيل اين مولكول وجود دارد و يك پيوند بين دو اتم تشكيل مي‌گردد.

چون لايه دروني 1s و اوربيتالهاي حاصل از ان كاملا پر مي‌باشند مي‌توانيم از نشانه لايه اول يعني K در نشان دادن ساختار الكتروني بصورت زير استفاده كنيم.

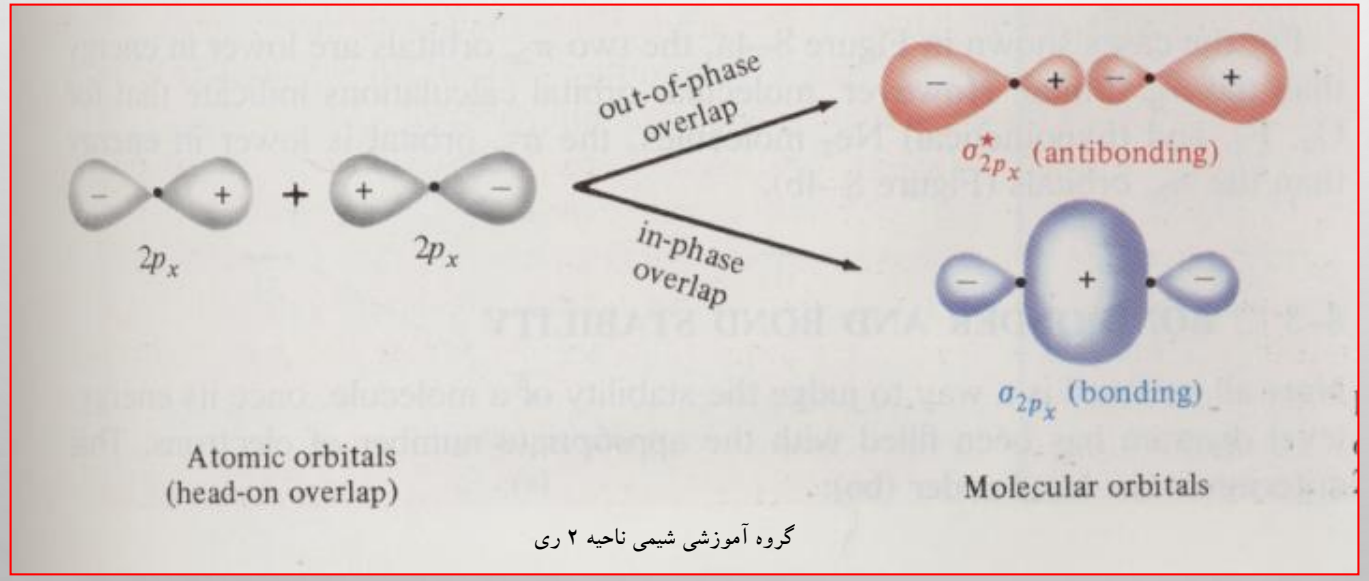
ساختار الكتروني Li_2 : $KK(\delta_{2S})^2$

مثال: تشكيل پيوند بين دو اتم بور را طبق تئوري اربيتال مولكولي بررسي نمائيد.

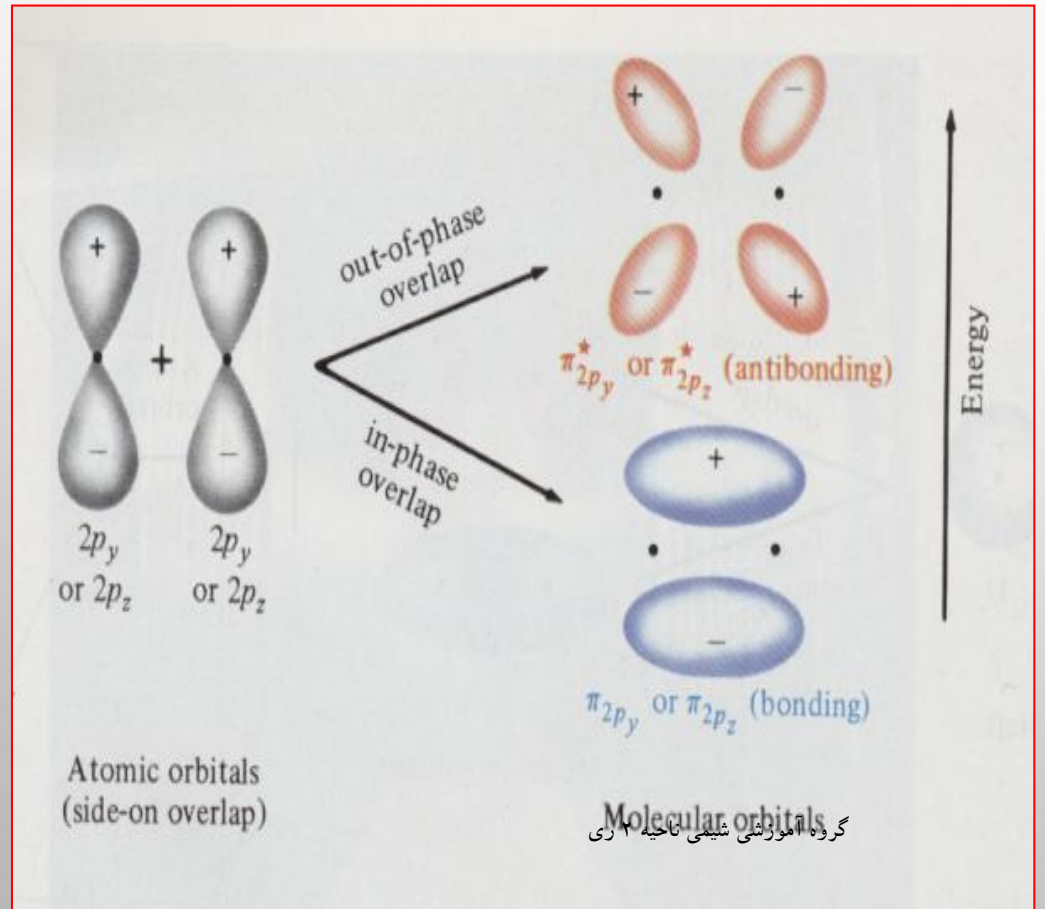
اتم بور در لايه ظرفيت خود سه الكترون دارد كه يكي از آنها در اربيتال 2p مي‌باشد. حال سوال اين است كه در تشكيل پيوند بين دو اتم بور اربيتالهاي p چگونه با يكديگر تركيب مي‌گردند؟

$B: 1s^2\ 2s^2\ 2p^1$

همانطور كه مي‌دانيم در لايه فرعي P سه اوربيتال دمبلي شكل داريم كه هر يك در راستاي يكي از محورهاي مختصات قرار دارد. حال در نظر مي‌گيريم كه دو اتم بور در راستاي محور X به يكديگر نزديك مي‌گردند در نتيجه اين نزديكي، دو اربيتال به صورت محوري با يكديگر تداخل مي‌كنند و همانطور كه در شكل مشاهده مي‌گردد دو اربيتال مولكولي σ_{2p} و σ^*_{2p} را تشكيل مي‌دهد.



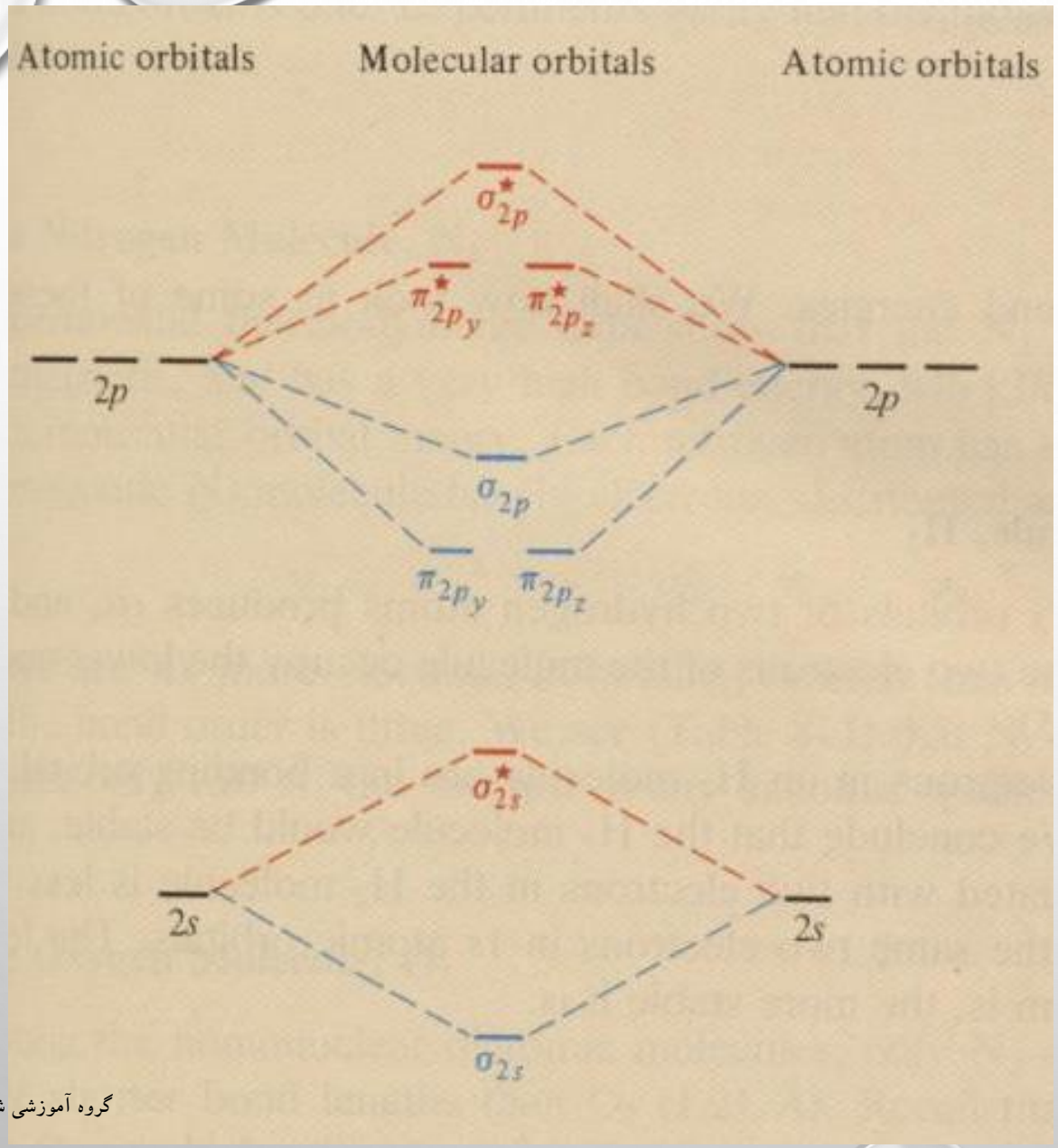
اکنون اربیتالهاي P_Y و P_Z را در نظر مي‌گيريم. هنگامي كه دو اتم بور در راستاي محور X به يكديگر نزديك مي‌گردند، اربيتالهاي P_Y و P_Z دو اتم بصورت موازي با يكديگر قرار دارند و فقط مي‌توانند از پهلو با يكديگر تداخل كنند.



حاصل اين تداخل تشكيل دو اربيتال پيوندي π_{2p_y} و π_{2p_z} و دو اربيتال ضد پيوندي $\pi^*_{2p_y}$ و $\pi^*_{2p_z}$ و مي‌باشد. تشكيل اربيتالهاي π و π^* در شكل روبرو نشان داده شده است.

چون ميزان تداخل اربيتالهاي p از جهت سربه سر از ميزان تداخل اربيتالهاي p از پهلو بيشتر است، پس سطح انرژي σ_{2p} از π_{2p} پائين‌تر مي‌باشد.

ولي در مورد مولكول B_2 بايد توجه داشته باشيم كه اختلاف انرژي اربيتالهاي 2S و 2P در اتم بور زياد نيست؛ بنابراين اوربيتال 2S يك اتم بور مي‌تواند با اربيتال 2P اتم بور ديگر تداخل كند و بر عكس. در نتيجه بين الكترونهاي موجود دراربيتال Σ_{2S} والكترونهای موجود در Σ_{2P} دافعه الكتريكي بوجود مي‌آيد و باعث مي‌شود كه انرژي اربيتال Σ_{2S} از انرژي اربيتالهاي Π_{2P} بيشتر باشد.



همين موضوع در مولكولهاي C_2 وN_2 نيز وجود دارد. بنابراين ترتيب افزايش انرژي اربيتالهاي مولكولي در مولكولهاي Li_2, Be_2, B_2, C_2 و N_2 به صورت روبرو تغيير مي‌كند.

B_2 تا N_2

با توجه به مطالب فوق ساختار الكتروني مولكول B_2 به صورت زير است.

$$B_2 \text{ ساختار الكتروني} = kk(\delta_{2s})^2(\delta^*_{2s})^2(\pi_{2p})^1(\pi_{2p})^1$$

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

مولكول از نظر مغناطيسي بدليل داشتن دو الكترون منفرد، پارامغناطيس مي‌باشد.

مثال: مولكول C_2 را از نظر تئوري اربيتال مولكولي بررسي نمائيد.

$${}_6C : 1S^2\ 2S^2\ 2P^2$$

مولكول C2 داراي 8 الكترون ظرفيتي مي‌باشد و پايدارترين ساختار الكتروني آن به صورت زير است.

$$C_2 : kk(\delta_{2S})^2(\delta^*_{2s})^2(\pi_{2p})^2(\pi_{2p})^2$$

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

يك پيوند دو گانه بين دو اتم كربن وجود دارد. نكته غير عادي در مورد اين پيوند دوگانه اين است كه هر دو پيوند از نوع Π مي‌باشند. نكته غير عادي ديگر اين كه بدليل نزديك بودن سطح انرژي Π_{2P} به ساختار الكتروني مولكول C_2 به صورت زير در مي‌آيد.

$$\text{ساختار الکترونی } N_2 : kk\,(\delta_{2s})^2(\delta^*_{2s})^2(\pi_{2p})^2(\pi_{2p})^1(\delta_{2P})^1$$

مثال: مرتبه پيوند را در مولكول N_2 محاسبه نمائيد.

$$_7N = 1S^2\ 2S^2\ 2P^3$$

مولكول N_2 داراي ده الكترون ظرفيتي و داراي ساختار الكتروني زير است.

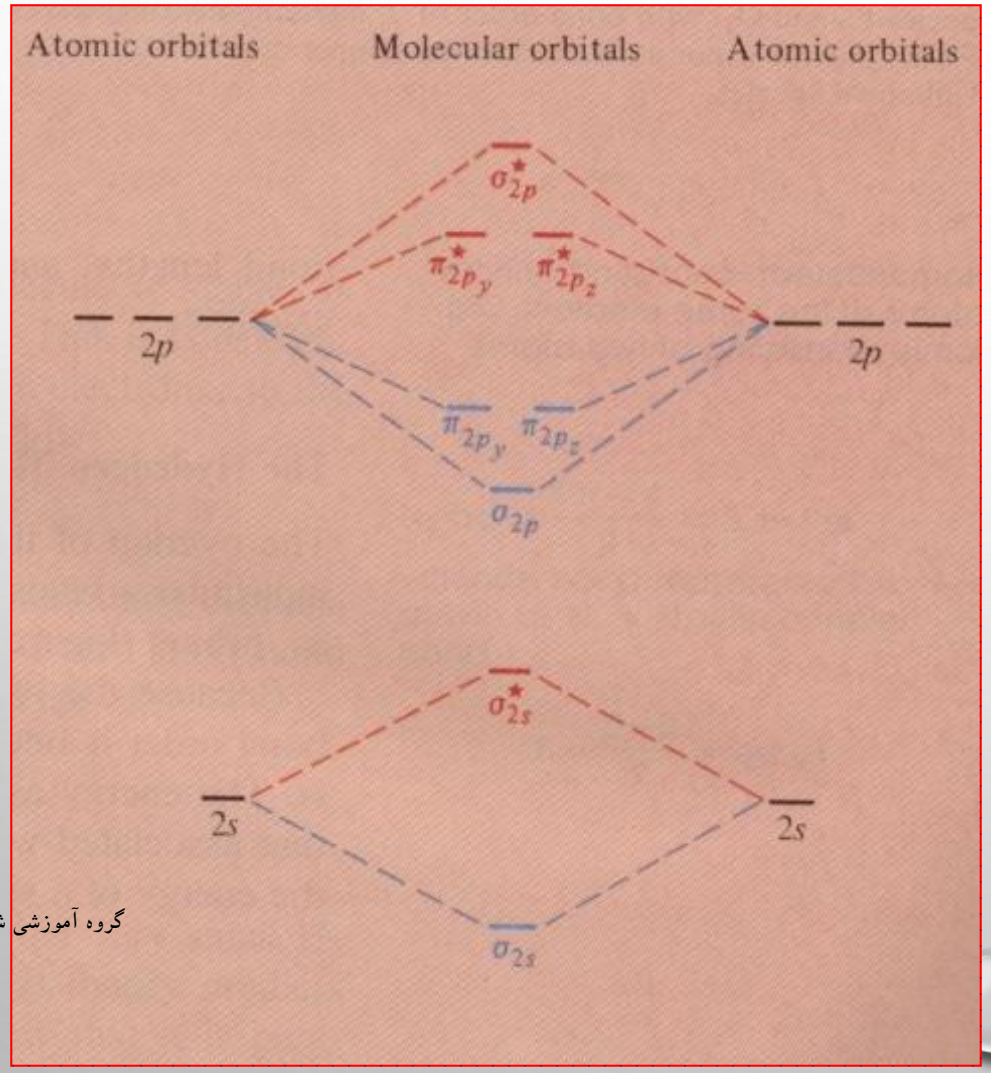
ساختار الكتروني N_2 : $kk\,(\delta_{2s})^2(\delta^*_{2s})^2(\pi_{2p})^2(\pi_{2p})^2(\delta_{2P})^2$

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

مرتبه پيوند در N_2 سه مي‌باشد يعني بين دو اتم نيتروژن يك پيوند سه گانه و جود دارد و مولكول از نظر مغناطيسي؛ ديا مغناطيس مي‌باشد.

مثال: مولكول O_2 را از نظر تئوري اربيتال مولكولي بررسي نمائيد.

$$_8O:1S^2\,2S^2\,2P^4$$



ترتيب افزايش انرژي اربيتالهاي مولكولي درمولكولهاي O_2، F_2 و Ne_2 مطابق شكل روبرو مي‌باشد.

مولکول O_2 داراي دوازده الکترون ظرفيتي مي‌باشد و ساختار الکتروني آن به صورت زير مي‌باشد.

مرتبه پيوند $O_2 = \frac{8-4}{2} = 2$

ساختار الکترونی $O_2 = kk\,(\delta_{2S})^2(\delta^*_{2S})^2(\delta_{2P})^2(\pi_{2P})^2(\pi_{2P})^2(\pi^*_{2P})^1(\pi^*_{2P})^1$

بين دو اتم اکسيژن يك پيوند دوگانه وجود دارد و مولکول پارامغناطيس مي‌باشد.

مثال: مرتبه پيوند در مولکول F_2 چند مي‌باشد؟

${}_9F : 1S^2\ 2S^2\ 2P^5$

ساختار الکتروني $F_2 = kk\,(\delta_{2S})^2(\delta^*_{2S})^2(\delta_{2P})^2(\pi_{2P})^2(\pi_{2P})^2(\pi^*_{2P})^2(\pi^*_{2P})^2$

مرتبه پيوند $F_2 = \frac{8-6}{2} = 2$

مثال: آیا امکان تشکیل مولکول NE_2 وجود دارد یا خیر؟

$$_{10}Ne: 1S^2\ 2S^2\ 2P^6$$

$$Ne_2 \text{ ساختار الكتروني} = kk\,(\delta_{2S})^2(\delta^*_{2S})^2(\delta_{2P})^2(\pi_{2P})^2(\pi_{2P})^2(\pi^*_{2P})^2(\pi^*_{2P})^2(\delta^*_{2P})^2$$

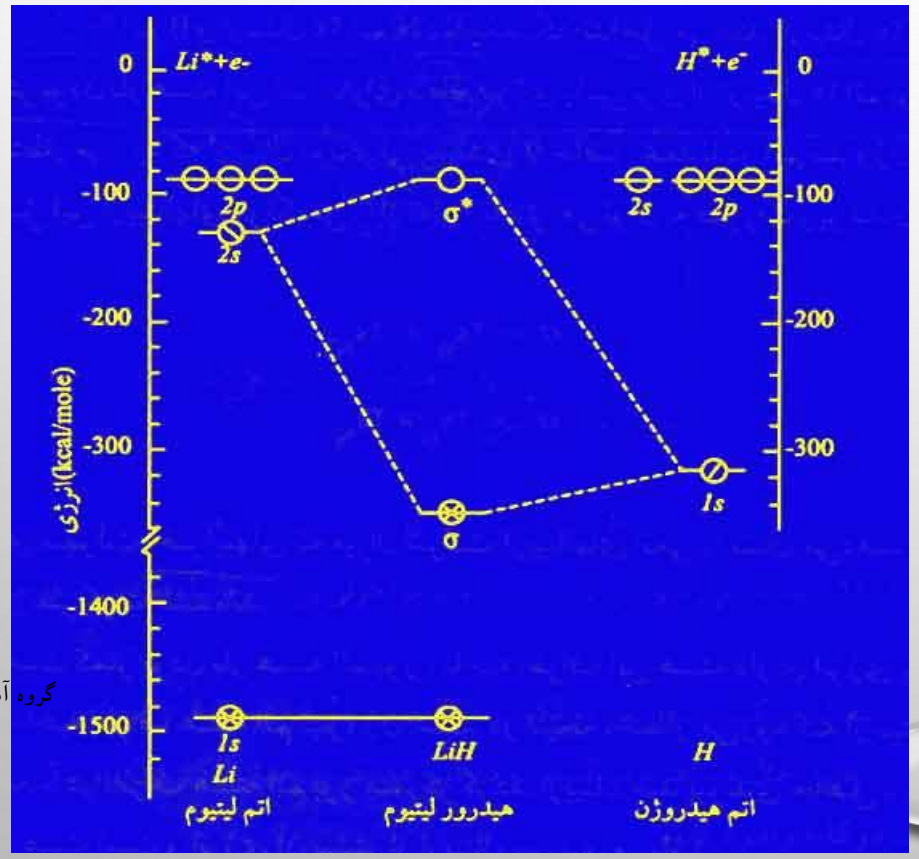
$$Ne_2 \text{ مرتبه پیوند} = \frac{8-8}{2} = 2$$

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

مثال: امكان تشكيل مولكول هيدريدليتيم را از نظر تئوري اربيتال مولكولي بررسي نمائيد.

هنگامي كه دو اتم هيدروژن و ليتيم به يكديگر نزديك مي‌گردند. اربيتالهاي ظرفيتي آنها با هم تركيب شده (1S اتم هيدروژن و 2S اتم ليتيم) و يك اربيتال مولكولي پيوندي Σ و يك اربيتال ضد پيوندي *Σ بوجود مي‌آيد.

نمودار انرژي اربيتالهاي مولكولي براي مولكول LiH در شكل روبرو نشان داده شده است.



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

چون الكترونگاتيوي اتم هيدروژن از اتم ليتيم بيشتر است، جفت الكترون پيوندي بيشتر در اطراف هيدروژن متمركز است بنابراين به علت پخش نامتقارن الكترونهاي پيوندي، مولكول LiH قطبي مي‌شود.

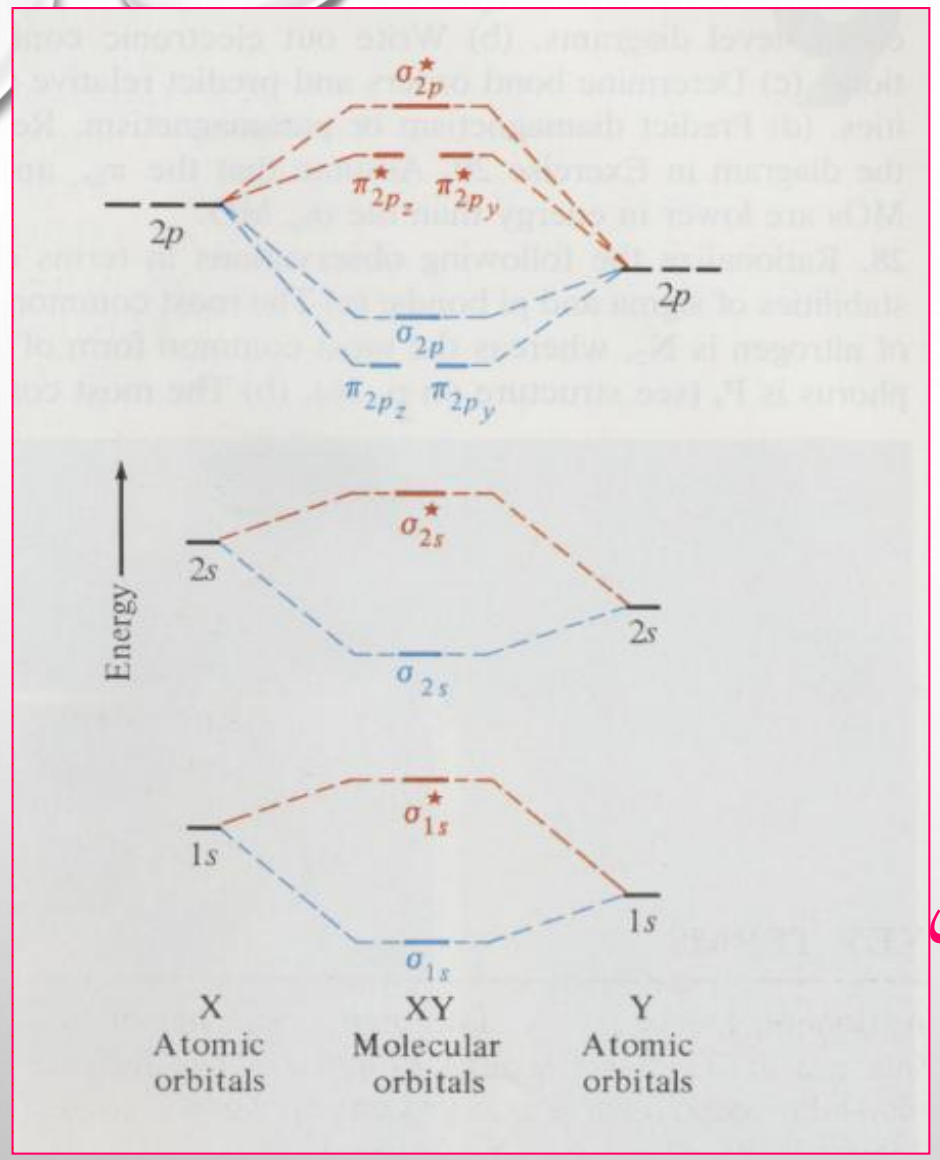
مثال: مولكول بورتيترید (BN) را از نظر تئوري اربيتال مولكولي بررسي نمائيد.

اربیتالهای 2S دو اتم B و N و اربيتالهاي 2P اين دو اتم با يكديگر تداخل كرده و اربيتالهاي مولكولی را بوجود مي‌آورند. از آنجائي كه الكترونگاتيوي نيتروژن از بور زيادتر مي‌باشد، الكترونهاي پيوندي بيشتر در اطراف اتم نيتروژن متمركز مي‌باشند. ساختار الكتروني BN به صورت زير مي‌باشد.

$$\text{ساختار الكتروني BN} = kk\,(\delta_{2S})^2(\delta^*_{2S})^2(\pi_{2P})^2(\pi_{2P})^1(\delta_{2P})^1$$

چون سطح انرژي اربيتال σ_{2p} اختلاف زيادي با سطح انرژي اربيتال π_{2p} ندارد، دو الكترون آخر به طور منفرد اين دو اربيتال را اشغال مي‌كنند.

ترتيب افزايش سطح انرژي اربيتالهاي مولكولي براي مولكولهاي دو اتمي نا هم هسته حاصل از عناصر تناوب دوم جدول مانند NO, CO و CN مانند شكل زير مي‌باشد (اتم Y الكترونگاتيوتر از X اتم مي‌باشد).



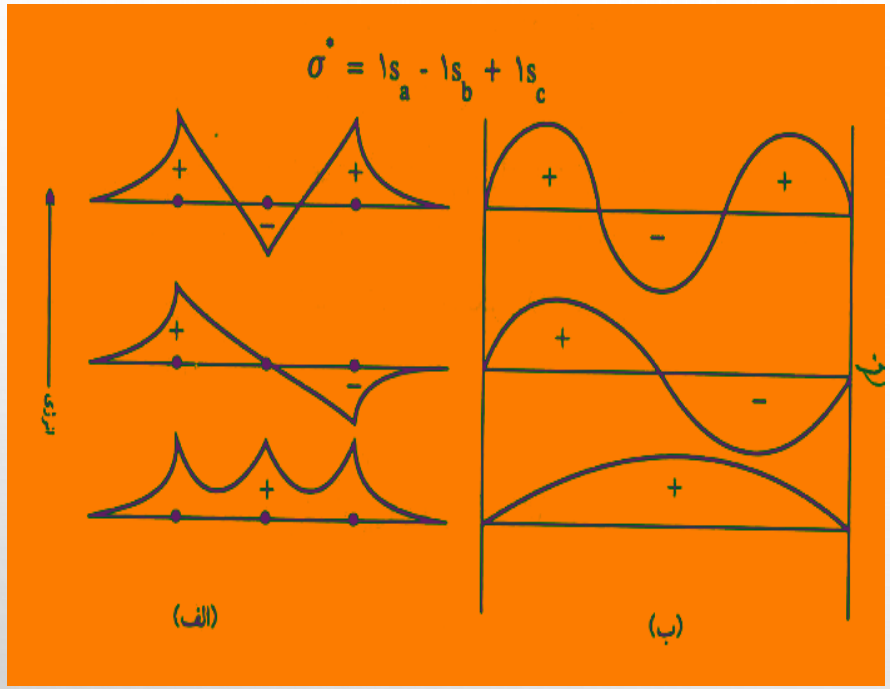
به عنوان مثال ساختار الكترونی CO به صورت زير می باشد.

ساختار الكتروني CO = $kk\,(\delta_{2S})^2(\delta^*_{2S})^2(\pi_{2P})^2(\pi_{2P})^2(\delta_{2P})^2$

اربيتالهاي مولكولي چند هسته‌اي

ساده‌ترين مولكول سه اتمي مولكول H_3 مي‌باشد. سه اوربيتال 1s سه اتم H با هم تركيب شده و سه اوربيتال مولكولی بوجود مي‌آورند. اگر هرسه اوربيتال 1s با علامتهاي يكسان تركيب شوند، يك اربيتال پيوندي σ تشكيل مي‌شود. دومين اربيتال بين دو اتم انتهائي خاصيت ضد پيوندي و بين دو اتم مجاور خاصيت پيوندي دارد پس آنرا ضد پيوندي ضعيف در نظر مي‌گيريم. سومين اربيتال مولكولي كه از تركيب اربيتالهاي 1s با علامتهاي متناوب مثبت و منفي ايجاد مي شود، خاصيت ضد پيوندي قوي دارد.

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



دو الکترون ازسه الکترون مولکول H_3 در اربیتال مولکولي پیوندي و الکترون سوم در اربیتال مولکولي ضد پیوندي ضعیف قرار مي‌گیرد.

با توجه به اینکه این اربیتال بین دو اتم انتهائي خاصیت ضد پیوندي دارد پس دو اتم انتهائي باید تا حد ممکن از یکدیگر دور قرار گیرند، به این ترتیب شکل مولکول باید خطي باشد.

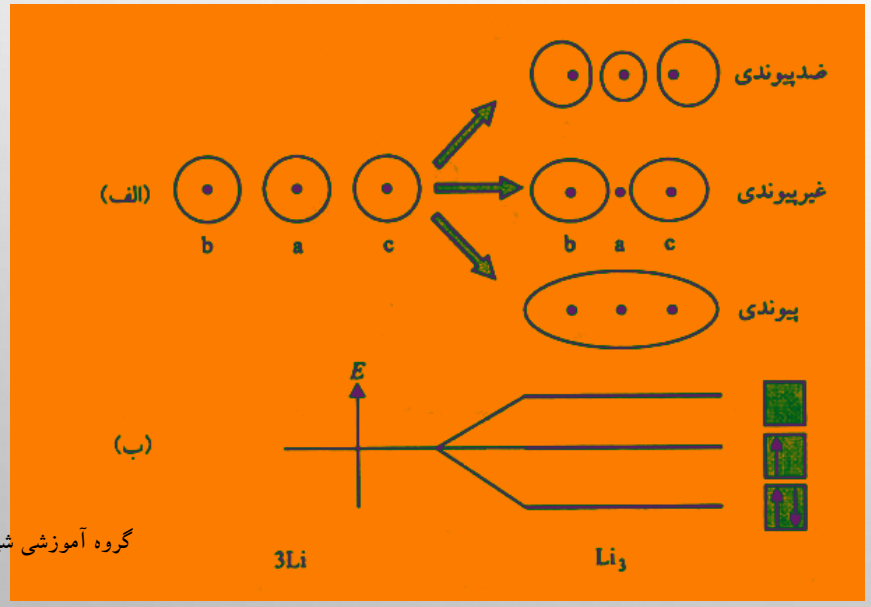
پيوند فلزي

فلزات داراي دو ويژگي مهم مي‌باشند. يكي اينكه انرژي يوني شدن و الكترونگاتيوي آنها پائين است ديگري اينكه تعداد الكترونهاي ظرفيتي در فلزات از تعداد اربيتالهاي ظرفيتي كمتر است. پائين بودن انرژي يوني شدن والكترونگاتيوي باعث مي‌شود كه الكترونهاي يك اتم فلز براحتي از اطراف هسته دور گردد و به اطراف ساير هسته‌ها برود.

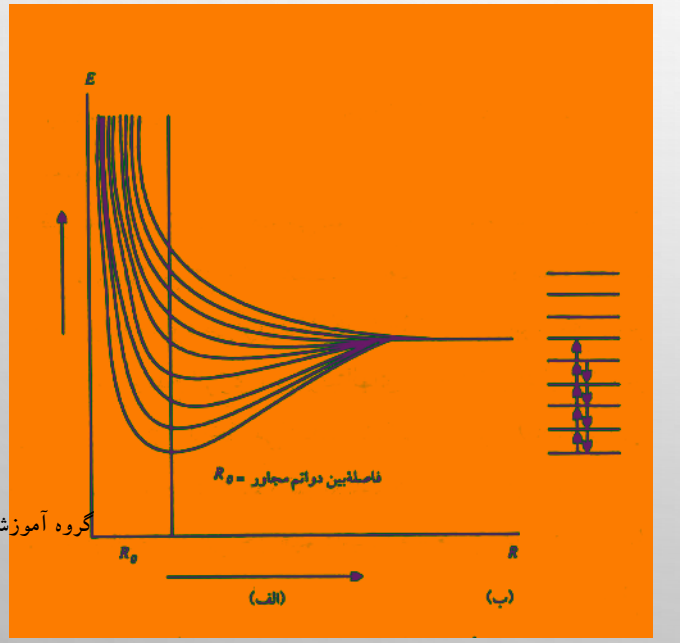
خالي بودن اكثر اربيتالهاي ظرفيتي باعث مي‌شود كه در فاز متراكم، هر اتم بتواند از الكترونهاي متعلق به اتمهاي مجاورش استفاده كند.

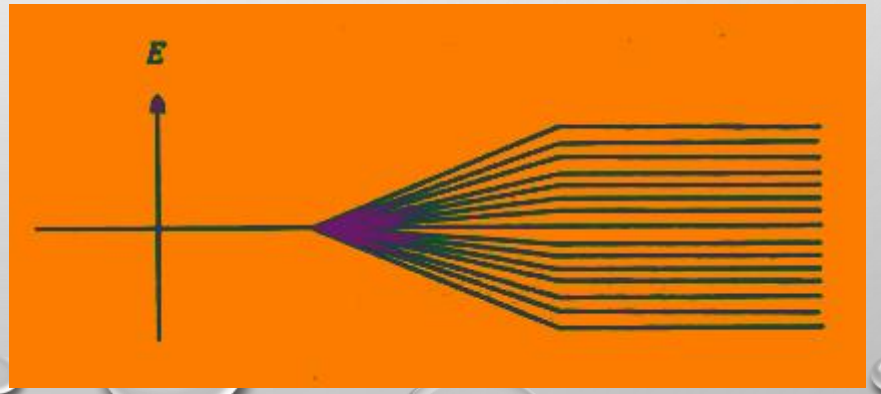
حال تشكيل پيوند بين دو اتم ليتيم را در نظر مي‌گيريم. از نزديك شدن دو اتم ليتيم به يكديگر، اربيتالهاي 2S آنها با هم تركيب شده و دو اربيتال مولكولي σ_{2s} و σ^*_{2s} تشكيل مي‌شود پس دو الكترون ظرفيت در اربيتال پيوندي قرار مي‌گيرد و مولكول Li_2 تشكيل مي‌گردد.

اگر سه اتم ليتيم را به هم نزديك كنيم سه اربيتال مولكولي پيوندي؛ غير پيوندي و ضد پيوندي ايجاد مي شود. تشكيل اربيتالهاي مولكولي در شكل روبرو مشاهده مي‌گردد.



حال اگر نه اتم ليتيم به يكديگر نزديك گردند، نه اربيتال مولكولي تشكيل مي‌شود كه مطابق شكل يك نوار انرژي تشكيل مي‌دهند. وقتي فاصله هر اتم ليتيم تا اتم ليتيم مركزي به R_0 برسد انرژي اربيتالهاي مولكولي پيوندي به حداقل مي‌رسد سپس نه الكترون ظرفيتي ليتيم در اين اوربيتالهاي مولكولي قرار مي‌گيرند. هر يك از اين اربيتالهاي مولكولي نه هسته‌اي هستند و الكترونهاي پيوندي در اطراف هر نه هسته در تردد مي‌باشند.





چون نصف اربيتالهاي مولكولي خالي مي‌باشند، الكترونهاي ظرفيتي بسيار متحرك مي‌باشند و بالا بودن قابليت هدايت گرمائي و الكتريكي با توجه به اين مسئله قابل توجيه مي‌باشد.

به همين ترتيب از نزديك شدن N اتم ليتيم به يكديگر، N اربيتال مولكولي به وجود مي‌آيد. هر قدر تعداد اربيتالهاي تركيب شونده بيشتر باشد، اختلاف انرژي بين اربيتالهاي مولكولي حاصل كمتر مي‌شود. در واقع در بلور فلز، تعداد اتمها آنقدر زياد است كه باعث مي‌شود اختلاف انرژي بين اربيتالهاي مولكولي حاصل خيلي كم گردد و در نتيجة آن سطوح انرژي اربيتالهاي مولكولي تشكيل يك نوار انرژي را مي‌دهند.

چون فاصله بين اربيتالهاي مولكولي حاصل كم مي‌باشد، فلزات مي‌توانند نورهاي با طول موجهاي مختلف را جذب كرده و به حالت تحريك شده در آيند و در برگشت به حالت پايه انرژي جذب شده را به صورت فوتون از دست بدهند. اين مسئله باعث جلاي فلزي مي‌گردد.

مثال: تشكيل پيوند فلزي در اتم‌هاي برليم را بررسي نمائيد.

$_{4}Be: 1S^2\ 2S^2$

در بلور فلز برليم مانند فلز ليتيم، اربيتالهاي 2s اتم Be با هم تركيب شده و يك نوار انرژي را بوجود مي‌آورند ولي كل اين نوار توسط الكترونهاي ظرفيتي برليم پر مي‌شود وجاي خالي براي حركت الكترونها باقي نمي‌ماند و انتظار مي‌رود كه برليم خواص فلزي نداشته باشد در حاليكه اينطور نيست.

اين مسئله به اين صورت توجيه مي‌شود كه اربيتالهاي 2p اتمهاي برليم نيز با يكديگر تركيب مي‌شوند و يك نوار انرژي تشكيل مي‌دهند. همانطور كه در شكل زير مشاهده مي‌گردد، چون اختلاف انرژي بين اربيتالهاي 2s و 2p زياد نيست، نوارهاي انرژي حاصل از اربيتالهاي 2s و 2p تداخل كرده و تشكيل يك نوار انرژي واحد مي‌دهند.

حال اگر N اتم برليم به يكديگر نزديك گردند 4N اربيتال مولكولي (N اربيتال مولكولي حاصل از 2S و 3N اربيتال مولكولي حاصل از 2P) خواهيم داشت كه بايد تعداد 2N الكترون ظرفيتي را در خود جاي دهد.

سپس در نوار انرژي حاصل از همپوشاني نوارهاي انرژي 2S و 2P، 3N اربيتال مولكولي خالي خواهد بود و الكترونهاي ظرفيتي براحتي مي‌توانند در سراسر بلور جابجا كردند سپس برليم داراي خواص فلزي مي‌باشد. اين نوار انرژي (شكل زير) كه از همپوشاني نوار انرژي حاصل از 2S و 2P ايجاد مي شود، در بلور فلز ليتيم و ساير فلزات نيز ايجاد خواهد شد.