جامعة تكريت
كلية التربية للبنات
قسم: الكيمياء
المرحلة: الثالثة
المادة: الكيمياء التناسقية

عنوان المحاضرة: نظرية الاوربيتال الجزيئي (M.O.T)

اسم التدريسي: م.د. دينا سعدي محمدصبحي
الايميل الجامعي: deena3@tu.edu.iq

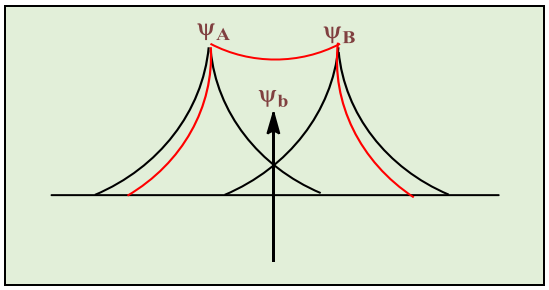
نظرية الاوربيتال الجزيئي (Molecular Orbital Theory) (M.O.T)

تأخذ هذه النظرية بنظر الاعتبار الصفة الايونية والصفة التساهمية للاصرة التناسقية بين الايون الفلزي المركزي والليكاندات لذلك فنظرية الاوربيتال الجزيئي تفسر التآصر بين الفلز والليكاند كما يلي:

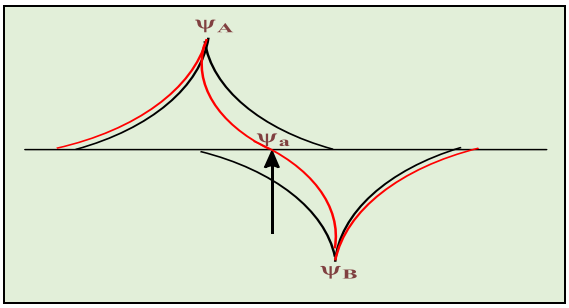
1- يحصل التآصر بين الفلز والليكاند نتيجة التداخل ما بين اوربيتالات الايون الفلزي و اوربيتالات الليكاند وذلك لتكوين اوربيتالات جزيئية اكبر حجماً حيث يمكن للالكترونات الحركة فيها بحرية اكثر، ان الاوربيتالات الجزيئية المتكونة مشابهة للاوربيتالات الذرية للذرات، اذ تتكون الاوربيتالات بطريقة الاتحاد للاوربيتالات الذرية وفيها يحصل عملية جمع وطرح للأجزاء المتداخلة من الاوربيتالات الذرية.

2- تتداخل الاوربيتالات الذرية للفلز والاوربيتالات الذرية لليكاند او المهجنة لليكاند حيث يتكون ثلاثة أنواع من الاوربيتالات الجزيئية:

- اوربيتال جزيئي ترابطي (تآصري) (B.M.O) bonding molecular orbital ψ_b ويشمل تآصر من نوع سيكما وباي σ & π وهذا النوع من الاوربيتالات ينتج عن عملية جمع الاوربيتالين الذريين لذلك فإن الاوربيتال الجزيئي الترابطي (التاصري) (ψ_b) يتضمن المكان المحصور بين نواتي الذرتين وتكون طاقتهُ اوطأ من طاقة الاوربيتالين الذريين كما موضح:



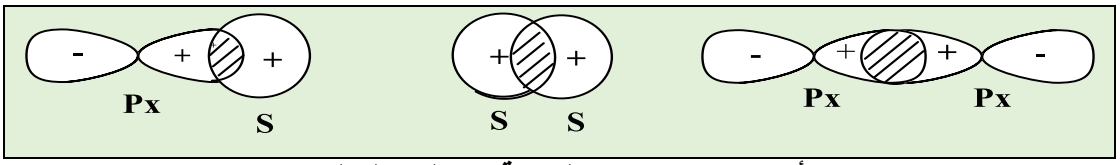
- اوربيتال جزيئي مضاد للترابط (مضاد للتآصر) (anti bonding molecular orbitals) (A.B.M.O) ψ_a ويشمل تآصر من نوع π^*, σ^* وهذا النوع من الاوربيتالات ينتج عن عملية طرح الاوربيتالين الذريين لذلك فإنهُ لا يتضمن المكان المحصور بين النواتين ولذلك يدعى بالاوربيتال الجزيئي المضاد للتآصر من نوع ψ_a والذي تكون طاقتهُ اعلى من طاقة الاوربيالتين الذريين كما موضح:



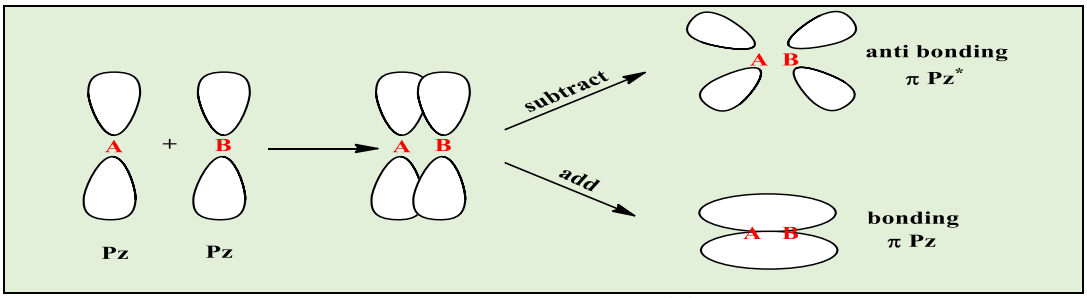
- اوربيتـال جزيئـي لا ترابطـي (لا تآصـري) (nonbonding molecular orbitals) ψ_n (N.B.M.O) فـي حالـة عـدم حصـول تـداخل جمـع او تـداخل طـرح فـان الاوربيتـالات الناتجـة تسـمى اوربيتـالات غيـر تاصـرية ψ_n كمـا فـي اتحـاد اوربيتـال الـذري s مـع اوربيتـال Py او اوربيتال Pz.

3- التـداخل الرأسـي للاوربيتـالات الذريـة يُكـون اوربيتـال جزيئـي تآصـري ψ_b مـن نـوع سـيكما σ بينما التداخل الجانبي يؤدي الى تكوين اوربيتال جزيئي تآصري ψ_b من نوع باي π.

كما موضح في مخططات التداخلات الاتية:



أنواع الاوربيتالات الناتجة من التداخل الراسي



مخطط يوضح تداخل اوربيتال pz

حساب رتبة الاصرة B.O حسب نظرية الاوربيتال الجزيئي:

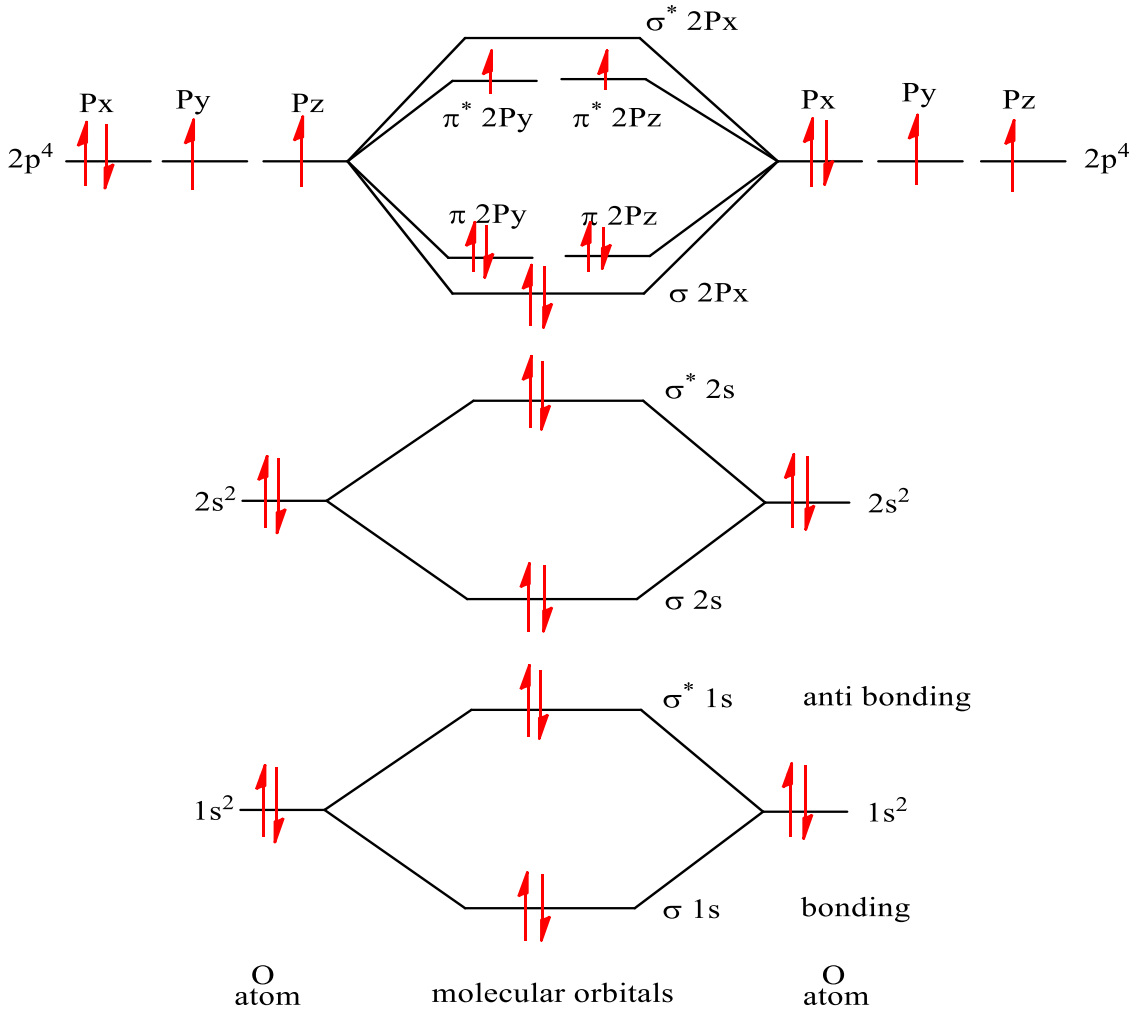
يـتم حسـاب رتبـة الاصـرة مـن خـلال عـدد الالكترونـات الموجـودة فـي الاوربيتـالات الجزيئيـة التآصـرية نـاقص عـدد الالكترونـات الموجـودة فـي الاوربيتـالات الجزيئيـة المضـاد للتآصـر تقسم رقم 2.

$$B.O = \frac{\text{no. of } e^- \text{ B.M.O} \quad - \quad \text{no. of } e^- \text{ A.B.M.O}}{2}$$

* احسبي رتبة الاصرة B.O لجزيئة O_2؟

$_8O = 1s^2\ 2s^2\ 2p^4$

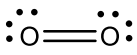
$_8O = 1s^2\ 2s^2\ 2p^4$



$$B.O = \frac{\text{no. of } e^- \text{ B.M.O} - \text{no. of } e^- \text{ A.B.M.O}}{2}$$

$$B.O = \frac{10 - 6}{2}$$

$$B.O = \frac{4}{2} = 2$$



اما الترتيب الالكتروني لجزئية O_2 هو:

$$O_2\ (\sigma 1s)^2\ (\sigma^* 1s)^2\ (\sigma\ 2s)^2\ (\sigma^*\ 2s)^2\ (\sigma\ 2Px)^2\ (\pi\ 2Py\ ,\ \pi\ 2Pz)^4\ (\pi^*\ 2Py\ \ ,\ \ \pi^* 2Pz)^2$$

*ارسمي مخطط مستويات الطاقة حسب نظرية الاوربيتال الجزيئي M.O.T للمعقد $[NiCl_4]^{+2}$؟

$[NiCl_4]^{+2}$

$Ni + (-1)4 = +2 \rightarrow Ni = +2$

$_{28}Ni = [_{18}Ar]\ 3d^8\ \ 4s^2$

$Ni^{+2} = [_{18}Ar]\ 3d^8\ 4s^0$

$4Cl^- = 4 \times 2e \rightarrow 8e$

الصفة المغناطيسية / بارا مغناطيسي

الترتيب الالكتروني(الجزيئي) هو:

$$(A_1)^2\ (T_1)^6\ (E)^4\ (T_2^*)^4$$

كما موضح في مخطط الطاقة: