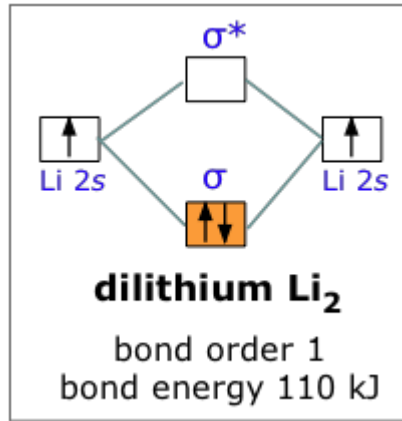


### Lithium Molecule

### جزيئة الليثيوم $Li_2$

تتكون جزيئة الليثيوم من اتحاد ذرتي ليثيوم تمتلك كل ذرة الكترون واحد في غلاف التكافؤ في اوربيتال من نوع s هو (2s) ويشغل الكترون تكافؤ الليثيوم الاوربيتال الجزيئي  $\sigma_s^b$  معطيا حالة الاستقرار او السكون للجزيئة والتي يعبر عنها بالترتيب الالكتروني  $(\sigma_{1s}^b)^2(\sigma_{1s}^*)^2(\sigma_{2s}^b)^2$  حيث لا ينتج عن الالكترونات التي تشغل الاوربيتالات الجزيئية  $\sigma_{1s}^b$  و  $\sigma_{1s}^*$  اي ترابط . في حين ان وجود الالكترونين في الاوربيتال الجزيئي  $\sigma_{2s}^b$  تسبب وجود اصرة واحدة في جزيئة الليثيوم من نوع سيكما ( $\sigma$ ) وبذلك فان هذه الجزيئة تمتلك صفات ديامغناطيسية ويمكن كتابة التركيب الالكتروني لجزيئة الليثيوم  $Li_2$  بالشكل التالي

$$(\sigma_{1s}^b)^2(\sigma_{1s}^*)^2(\sigma_{2s}^b)^2$$

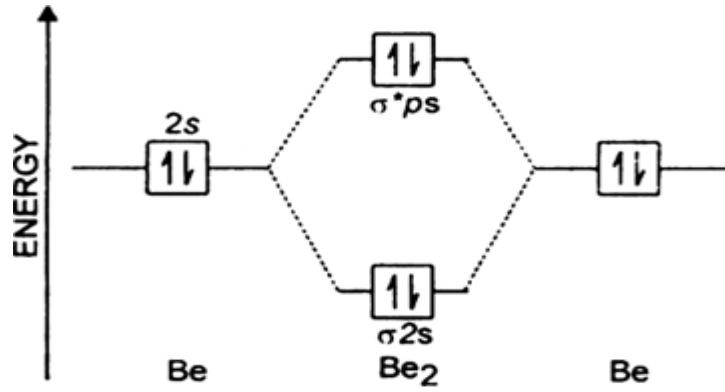


اذا قارنا الاصرة في جزيئة الليثيوم بالاصرة في جزيئة الهيدروجين التي طولها (0.74) انكستروم فان طول اصرة جزيئة الليثيوم يساوي (2.67) انكستروم ويعود الفرق في الطول لا صرة الليثيوم الى سببين : الاول ، هو كبر نصف القطر الحقيقي للاوربيتال 2S في الليثيوم . اما الثاني ، فيعزى الى التنافر المتبادل لزوج الالكترونات في الاوربيتال 1S حيث لا توجد مثل هذه الازواج الالكترونية في جزيئة الهيدروجين ، كما انه من المتوقع ان تكون طاقة الاصرة في جزيئة الليثيوم (26.3 كيلو سعرة مول<sup>-1</sup>) اقل من طاقة الاصرة في جزيئة الهيدروجين (103.2 كيلو سعرة مول<sup>-1</sup>) ويعود ذلك الى ان الكترون  $\sigma_s^b$  في المعدل اكثر قربا من نواتي جزيئة الليثيوم المحجوبتين مما هو عليه مع نواتي جزيئة الهيدروجين . بالإضافة الى ان الطاقة الكامنة للجزيئة بسبب قلة قوى الجذب بين الالكترون والنواة .

### Beryllium Molecule

### جزيئة البريليوم

توجد في ذرتي البريليوم ثمانية الكترونات تدخل اربعة منها اوربيتالات  $\sigma_{1s}^b$  و  $\sigma_{1s}^*$  الجزيئية اما الالكترونات الاربعة الاخرى فتشغل الاوربيتالات  $\sigma_{2s}^b$  و  $\sigma_{2s}^*$  وبذلك يكون الترتيب الالكتروني لجزيئة البريليوم كما يلي  $(\sigma_{1s}^b)^2(\sigma_{1s}^*)^2(\sigma_{2s}^b)^2(\sigma_{2s}^*)^2$  وتكون رتبة الاصرة صفرا كما في جزيئة الهيليوم وهو ما يتفق وعدم تكوين جزيئة البريليوم  $Be_2$  حسب مبادئ الترابط هذه

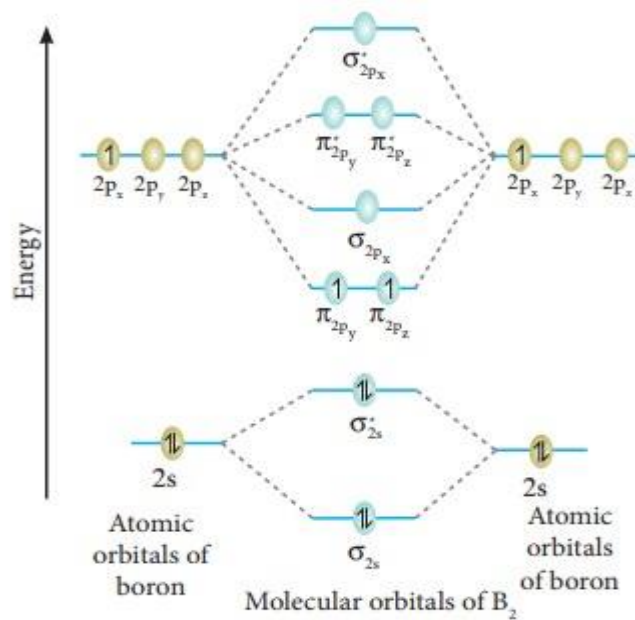


## Boron Molecule

## جزيئة البورون

تمتلك ذرة البورون التركيب الالكتروني  $1s^2 2s^2 2p^1$  وبذلك يكون لجزيئة البورون عشرة الكترونات تحدد الاوربيبتالات الجزيئية ، يمكن كتابة التركيب الالكتروني لجزيئة  $B_2$  في حالة الاستقرار او السكون كما يلي :

$$(\sigma_{1s}^b)^2 (\sigma_{1s}^*)^2 (\sigma_{2s}^b)^2 (\sigma_{2s}^*)^2 (\pi_{2py,z}^b)^2$$



حيث ينتج عن هذا الترتيب اصرة واحدة

نلاحظ من الترتيب الالكتروني للحالة المستقرة للجزيئة ان مستوى الطاقة للاوربيبتال  $\sigma_{2px}^b$  يكون اعلى من مستوى طاقة كل من الاوربيبتالات  $\pi_{2py}^b$  و  $\pi_{2pz}^b$  لقد اسندت نتائج التجارب العملية الترتيب الالكتروني المقترح لجزيئة البورون حيث اظهرت هذه النتائج بان لجزيئة البورون الكترونان منفردان يشغلان اوربيبتالين من صنف  $\pi$  حسب قاعدة هوند . وبذلك يكون لجزيئة البورون صفات بارامغناطيسية كما هو متوقع من مخطط مستويات الطاقة المقترح ( المخطط السابق) كما ان قوة الاصرة ( طاقة الاصرة ) بين ذرتي البورون (B-B) مساوية الى (65 كيلو سعرة مول<sup>-1</sup>) اكثر بكثير من طاقة الاصرة بين ذرتي الليثيوم في جزيئة الليثيوم وهذا يتفق مع حقيقة كون حجم ذرة البورون صغير وكذلك فان الكترونها التكافؤية اكثر ارتباطا وتقيدا مما عليه الكترونات 2S في Li. كذلك نجد عند مقارنة اطوال الاواصر B-B مع Li-Li ان طول اصرة البورون يساوي ( $1.59 \text{ \AA}$ ) وهي اقصر من الاصرة في الليثيوم ( $2.67 \text{ \AA}$ ) ، ويعود السبب في ذلك الى نقص نصف القطر الحقيقي المصاحب لزيادة  $z^*$  الشحنة المؤثرة للنواة .

## جزيئة الكربون Carbon Molecule

يحتوي الكربون على أربعة إلكترونات في غلافة الخارجي اثنان في 2S واثنان في 2P فيصبح لدينا في الغلاف الخارجي لذرتي كربون ثمان إلكترونات والتي يمكن استيعابها في اول اربع اوربيتالات جزيئية وطئهما اوربيتالات 2S والتي تنقسم الى نوعين من الاوربيتالات الجزيئية ( الاوربيتالات التاصرية ) و ( الاوربيتالات المضادة للتاصر ) وبالتالي فان الالكترونات الاربعه الاولى لا تساهم في نتيجة التاصر تدخل الالكترونات الاربعه الاخرى في اوربيتالات 2P التاصرية وبذلك لا يوجد لدينا الكترونات اضافية لكي تدخل في الاوربيتالات المضادة للتاصر من نوع 2P لذا نتوقع ان يكون جزيئة ثنائية الكربون مستقرة لكن شديدة التفاعل فهي موجودة فقط في الطور الغازي

### Molecular orbital diagram of carbon molecule (C<sub>2</sub>)

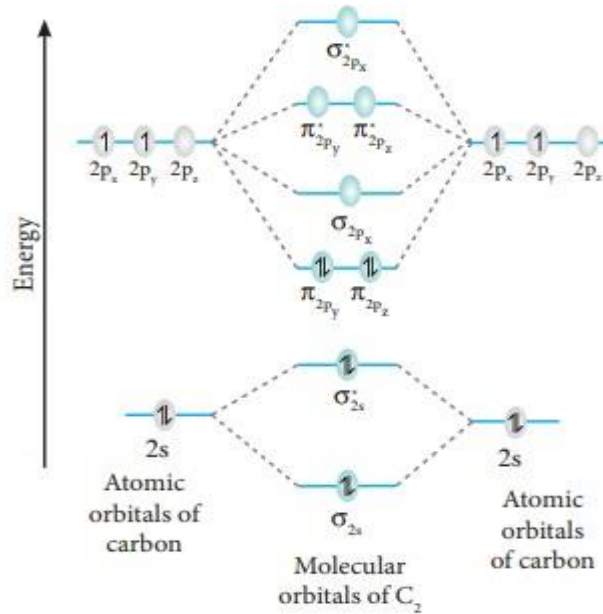
Electronic configuration of C atom 1s<sup>2</sup> 2s<sup>2</sup> 2p<sup>2</sup>

Electronic configuration of C<sub>2</sub> molecule

$$\sigma_{1s}^2, \sigma_{1s}^{*2}, \sigma_{2s}^2, \sigma_{2s}^{*2}, \pi_{2p_y}^2, \pi_{2p_z}^2$$

$$\text{Bond order} = \frac{N_b - N_a}{2} = \frac{8 - 4}{2} = 2$$

Molecule has no unpaired electrons hence it is diamagnetic.



وعليه سوف تكون رتبة الاصره في الكربون الثنائي ( جزيئة الكربون ) تساوي اثنان .اي ان الترتيب الالكتروني لجزيئة الكربون هو

$$(\sigma_{1s}^b)^2 (\sigma_{1s}^*)^2 (\sigma_{2s}^b)^2 (\sigma_{2s}^*)^2 (\pi_{2p_{y,z}}^b)^4$$

اثبتت القياسات العملية صحة هذا الترتيب الالكتروني وهو الاكثر استقرارا على الرغم من وجود ترتيب الكتروني اخر لجزيئة الكربون يكون اقل استقرارا هو

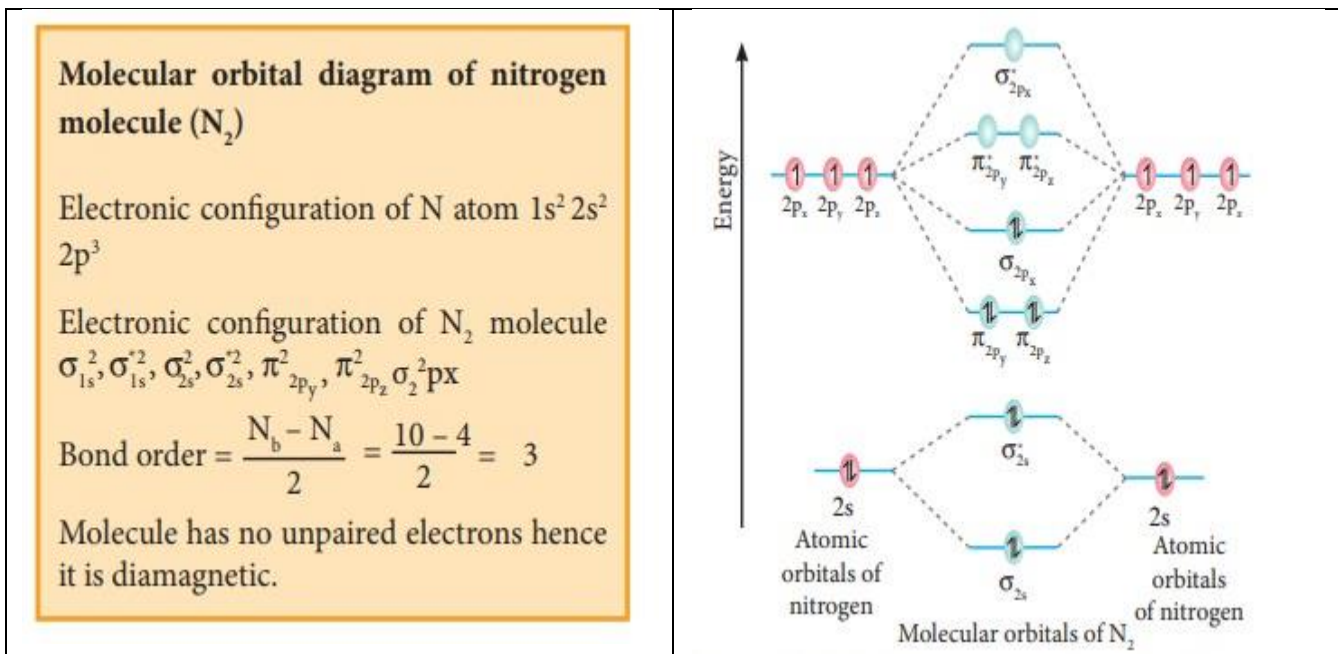
$$(\sigma_{1s}^b)^2 (\sigma_{1s}^*)^2 (\sigma_{2s}^b)^2 (\sigma_{1s}^*)^2 (\sigma_{2px}^b)^2 (\pi_{2py,z}^b)^2$$

علما ان الاختلاف في الطاقة بين الترتيبين المذكورين طفيف جدا وعندما تمتص جزيئة الكربون طاقة فيحدث تحول الكتروني من اوربيتال  $(\pi_{2py,z}^b)$  الى اوربيتال  $(\sigma_{2px}^b)$  وهذا ما يؤكد التشابه بين جزيئة الكربون وجزيئة البورون في مخطط مستويات الطاقة .

## جزيئة النتروجين Nitrogen Molecule

تحتوي جزيئة النتروجين على ١٤ الكترون تشغل اربع منها الاوربيتالات الجزيئية  $\sigma_{1s}^b$  و  $\sigma_{1s}^*$  وهي تلغي بعضها بعض اما الالكترونات الاربعة التالية فانها تشغل اوربيتالات جزيئية  $\sigma_{2s}^b$  و  $\sigma_{2s}^*$  وهي ايضا لا تشترك في تكوين الاواصر في حين ان الالكترونات الستة الباقية تحتل الاوربيتالات من نوع  $\sigma_{2p}^b$  و  $\pi_{y,z}^b$  كما في الشكل ادناه حيث تتكون ثلاث اواصر واحدة من نوع سيكما واثنان من نوع باي وهو الحد الاعلى للأواصر التي تستطيع ان تكونها جزيئات ثنائية الذرة لعناصر الدورة الثانية وهذا الترتيب يتفق مع الخواص المغناطيسية للجزيئة اي ان الترتيب الالكتروني هو

$$(\sigma_{1s}^b)^2 (\sigma_{1s}^*)^2 (\sigma_{2s}^b)^2 (\sigma_{1s}^*)^2 (\pi_{2py,z}^b)^4 (\sigma_{2px}^b)^2$$



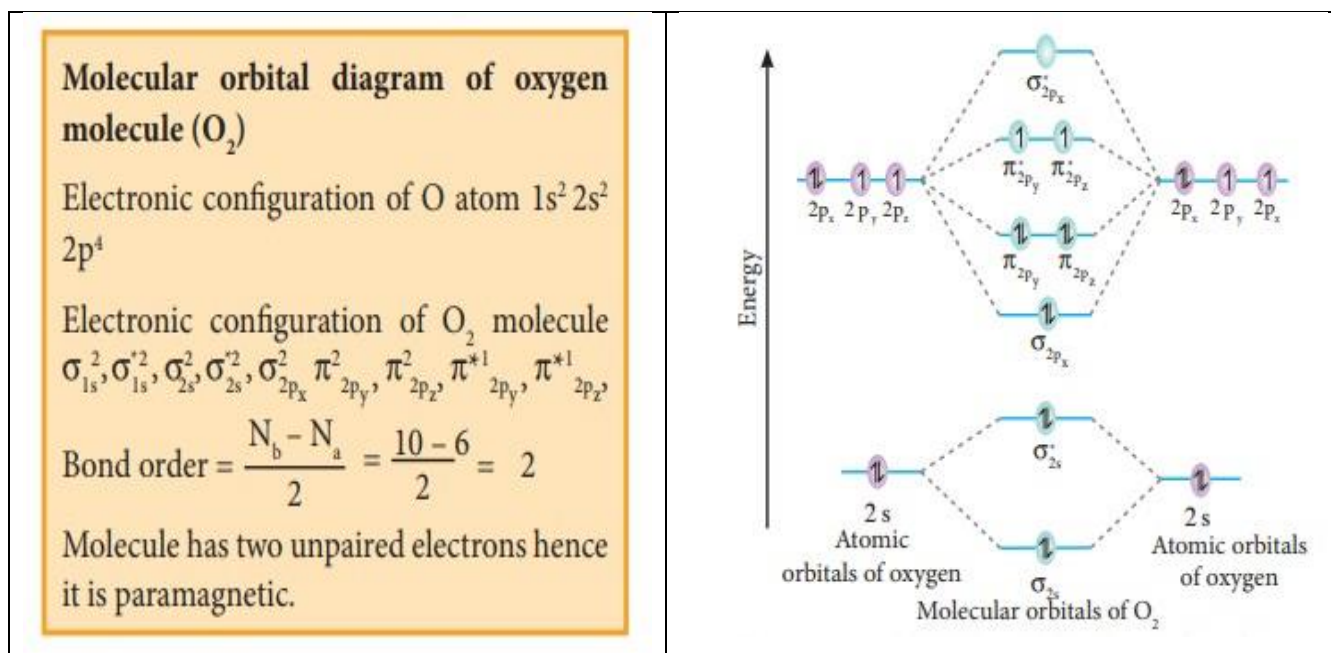
كذلك يمكن كتابة الترتيب الالكتروني كما يلي

$$(\sigma_{1s}^b)^2 (\sigma_{1s}^*)^2 (\sigma_{2s}^b)^2 (\sigma_{1s}^*)^2 (\sigma_{2px}^b)^2 (\pi_{2py,z}^b)^4$$

علما ان هذا الترتيب يقابل ترتيب لويس لجزيئة النتروجين والمتمثل  $N \equiv N$  حيث تحتوي جزيئة النتروجين على ثلاث اواصر وزوجين غير تاصرية لما كانت طاقة الاصرة في جزيئة النتروجين اعلى منها في اي جزيئة اخرى لذلك فانه من المتوقع ان تمتلك هذه الجزيئة ثباتا غير اعتيادي يتمثل في الطاقة العالية للاصرة (225Kcal./mol) علما ان الاصرة قصيرة جدا وطولها يساوي  $(1.1 \text{ \AA})$  اما الانتقال الالكتروني  $(\pi_{y,z}^b \rightarrow \sigma_{px}^b)$  الذي لوحظ في جزيئة الكربون فانه لا يلاحظ في جزيئة النتروجين وذلك للتشبع التام للاوربيتال  $\sigma_{px}^b$ .

## Oxygen Molecule جزيئة الاوكسجين

الترتيب الالكتروني لذرة الاوكسجين هو  $1s^2 2s^2 2p^4$  اي ان هناك ست الكترونات في غلاف التكافؤ لذا ففي جزيئة الاوكسجين نحن بحاجة الى استيعاب ١٢ الكترون في الاوربيتالات الجزيئية لذا نتوقع ان يكون هناك الكترونين في اوربيتالات مضادة للتاصر من نوع باي بشكل منفرد لان ذلك يؤدي الى تنافر اقل بين هذين الالكترونين كما في المخطط التالي



ليس من المستغرب بان تكون طاقة الاصرة في جزيئة الاوكسجين (498KJ/mol) اقل من طاقة الاصرة (945KJ/mol) في جزيئة النتروجين وذلك لوجود الكترونين منفردين لدى الاوكسجين في اوربيتال المضاد للتاصر من نوع باي وهذا يجعل جزيئة الاوكسجين تمتلك خواص بارامغناطيسية .

ان وجود هذين الالكترونين المنفردين في اوربيتال مضاد للتاصر يجعلنا نعتقد انه من الممكن جعل هذه الجزيئة اكثر استقرارا عن طريق ازالة احد هذين الالكترونين وبالتالي زيادة نسبة الالكترونات الترابطية على حساب الالكترونات المضادة للتاصر في الجزيئة ، ان هذا التوقع مطابق للواقع فان لأيون الاوكسجين الاحادي الموجب ( $O_2^+$ ) طاقة ارتباط اعلى من طاقة جزيئة الاوكسجين وبذلك يكون هذا الايون اكثر ثباتا ، وهذا يعني ايضا ان اضافة الكترون اخر الى جزيئة الاوكسجين المتعادلة سوف يزيد من نسبة الالكترونات المضادة للترابط على حساب الالكترونات الترابطية بحيث يكون ايون الاوكسجين الاحادي السالب ( $O_2^-$ ) اقل استقرار من جزيئة الاوكسجين اي اضعاف للأصرة بين ذرتي الاوكسجين وهذا يفسر الفعالية العالية لهذا الايون وعدم وجوده الا في الطور الغازي .

كما نلاحظ من المخطط ان جزيئة الاوكسجين تحتوي على مزدوجين الكترونيين في الاوربيتالات المضادة للتاصر ( مزدوجات غير تاصرية ) وهي المسؤولة عن اعطاء جزيئة الاوكسجين خواص فريدة تتميز بها.

## Carbon monoxide molecule جزيئة احادي اوكسيد الكربون

### Bonding in some heteronuclear di-atomic molecules

Molecular orbital diagram of Carbon monoxide molecule (CO)

Electronic configuration of C atom  $1s^2 2s^2 2p^2$

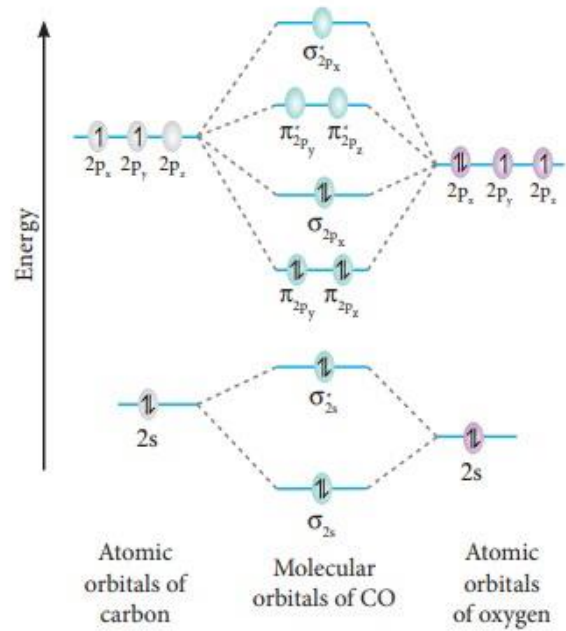
Electronic configuration of O atom  $1s^2 2s^2 2p^4$

Electronic configuration of CO molecule

$\sigma_{1s}^2, \sigma_{1s}^{*2}, \sigma_{2s}^2, \sigma_{2s}^{*2}, \pi_{2p_y}^2, \pi_{2p_z}^2, \sigma_{2p_x}^2$

$$\text{Bond order} = \frac{N_b - N_a}{2} = \frac{10 - 4}{2} = 3$$

Molecule has no unpaired electrons hence it is diamagnetic.



## Lithium Hydride Molecular جزيئة هيدريد الليثيوم

