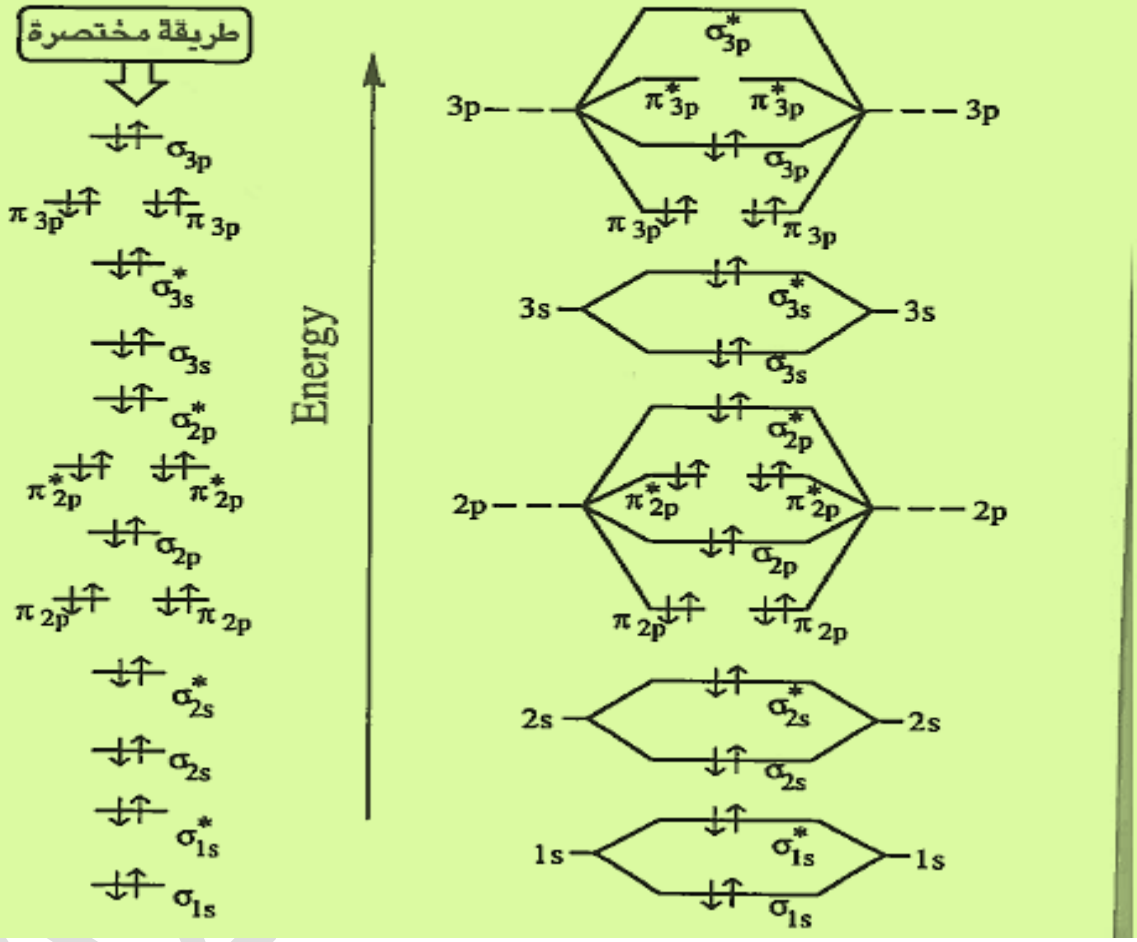
امثلة على نظرية الاوربيتال الجزيئي :

■ جزيء الفسفور P_2 ، (العدد الذري لـ P = 15)

● مخطط الطاقة للمدارات الجزيئية (MO) :

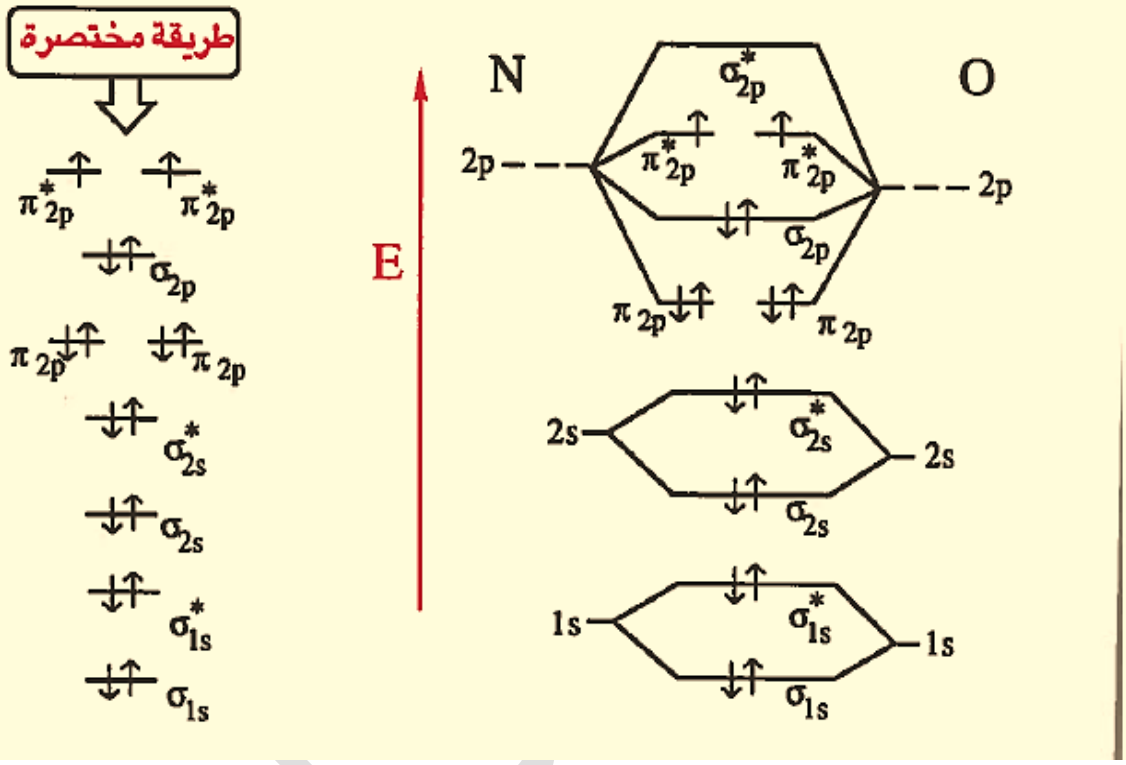


$$\text{Bond Order} = \frac{1}{2}(18-12) = 3$$

الصفة المغناطيسية : Diamagnetic وذلك لعدم وجود إلكترونات منفردة .

أيون أول أكسيد النيتروجين NO^- : (العدد الذري لـ N = 7 ، O = 8)

● مخطط الطاقة للمدارات الجزيئية (MO) :



● وبذلك يكون التوزيع الإلكتروني كما يلي :

$$NO^- : (\sigma_{1s})^2\ (\sigma^*_{1s})^2\ (\sigma_{2s})^2\ (\sigma^*_{2s})^2\ (\pi_{2p})^2\ (\pi_{2p})^2\ (\sigma_{2p})^2\ (\pi^*_{2p})^1\ (\pi^*_{2p})^1$$

ويمكن اختصار التوزيع بالشكل التالي :

$$NO^- : KK\ (\sigma_{2s})^2\ (\sigma^*_{2s})^2\ (\pi_{2p})^2\ (\pi_{2p})^2\ (\sigma_{2p})^2\ (\pi^*_{2p})^1\ (\pi^*_{2p})^1$$

● رتبة الرابطة (Bond Order) : $B.O = \frac{1}{2}(10 - 6) = 2$

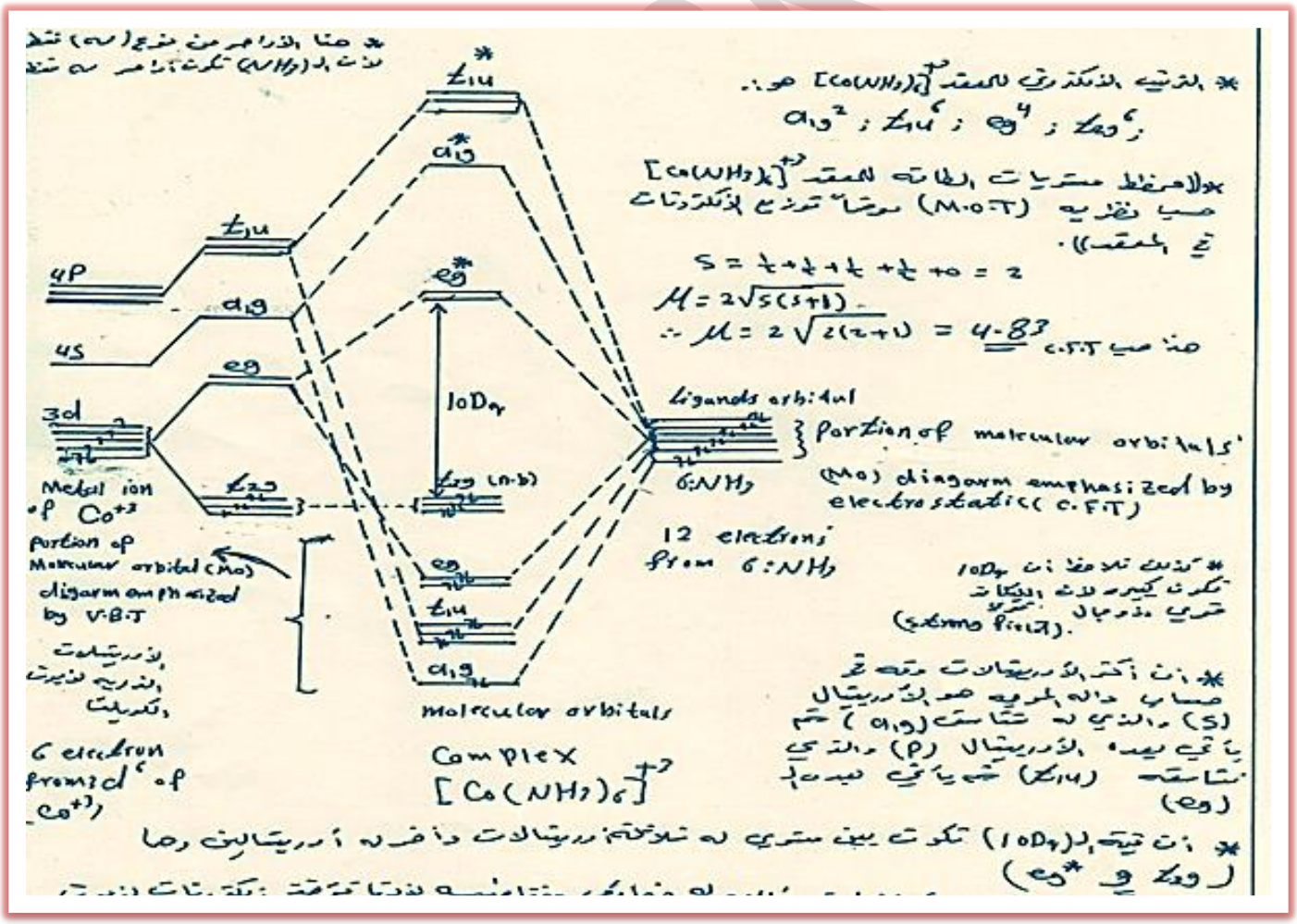
● الصفة المغناطيسية : Paramagnetic وذلك لوجود إلكترون منفرد .

لو اخذنا المعقد $[Co(NH_3)_6]^{+3}$ يحتوي هذا المعقد على **18** الكترون وهما (12) الكترون متأتية من الليكاندات NH_3 أما (6) الالكترونات المتبقية اتية من أيون الكوبلت Co^{+3} ولذلك تم تفسير هذا المعقد حسب نظرية الاوربيتال الجزيئي (M.O.T) يكون المخطط بالشكل التالي : وتدعى الليكاندات الواهبة ل σ وهناك انواع اخرى منها H_2O ، en ، R_2O وغيرها .

الترتيب الالكتروني للكوبلت

$_{27}Co$ $_{18}[Ar]\ 3d^7\ 4s^2$ in ground state

$_{27}Co^{+3}$ $_{18}[Ar]\ 3d^6\ 4s$ in excited state



في المخطط السابق نلاحظ ان قيمة 10 Dq تكون كبيرة وذلك لأن اليكاند الموجود في المعقد ليكاند قوي لذا يكون المجال قوي .

يوجد لدينا (9) اوربيتالات من الايون ألمركزي ولدينا (6) اوربيتالات من اليكاند فيكون المجموع الكلي للاوربيتالات الذرية هي (15) اوربيتال وعند امتزاجها مع بعض تعطي (15) اوربيتال جزيئي ست اوربيتالات تكون متآصره Bonding Molecular Orbital وثلاثة non-bonding تتوزع هذه الالكترونات على الاوربيتالات حسب طاقتها فكل اوربيتال يملئ بإلكترونيين .

بما أن 10 Dq > PT نلاحظ ان الالكترونات تزدوج لان اليكاند قوي .

لحساب رتبة الاصرة :

$$\text{Bond order} = \frac{\text{no. of electron in B.MO} - \text{no. of A.BM.O}}{2}$$

$$= 12\text{-}0 / 2 \longrightarrow 6$$

بعد ذلك نقسم رتبة الاصرة على عدد اليكاندات الموجودة في المعقد بمعنى ان رتبة الاصرة للمعقد تساوي واحد . يتبين أن المعقد اعلاه يمتلك صفة دايا مغناطيسية وذلك بسبب ازدواج الالكترونات في الاوربيتال t_2g .

Azal Shaker

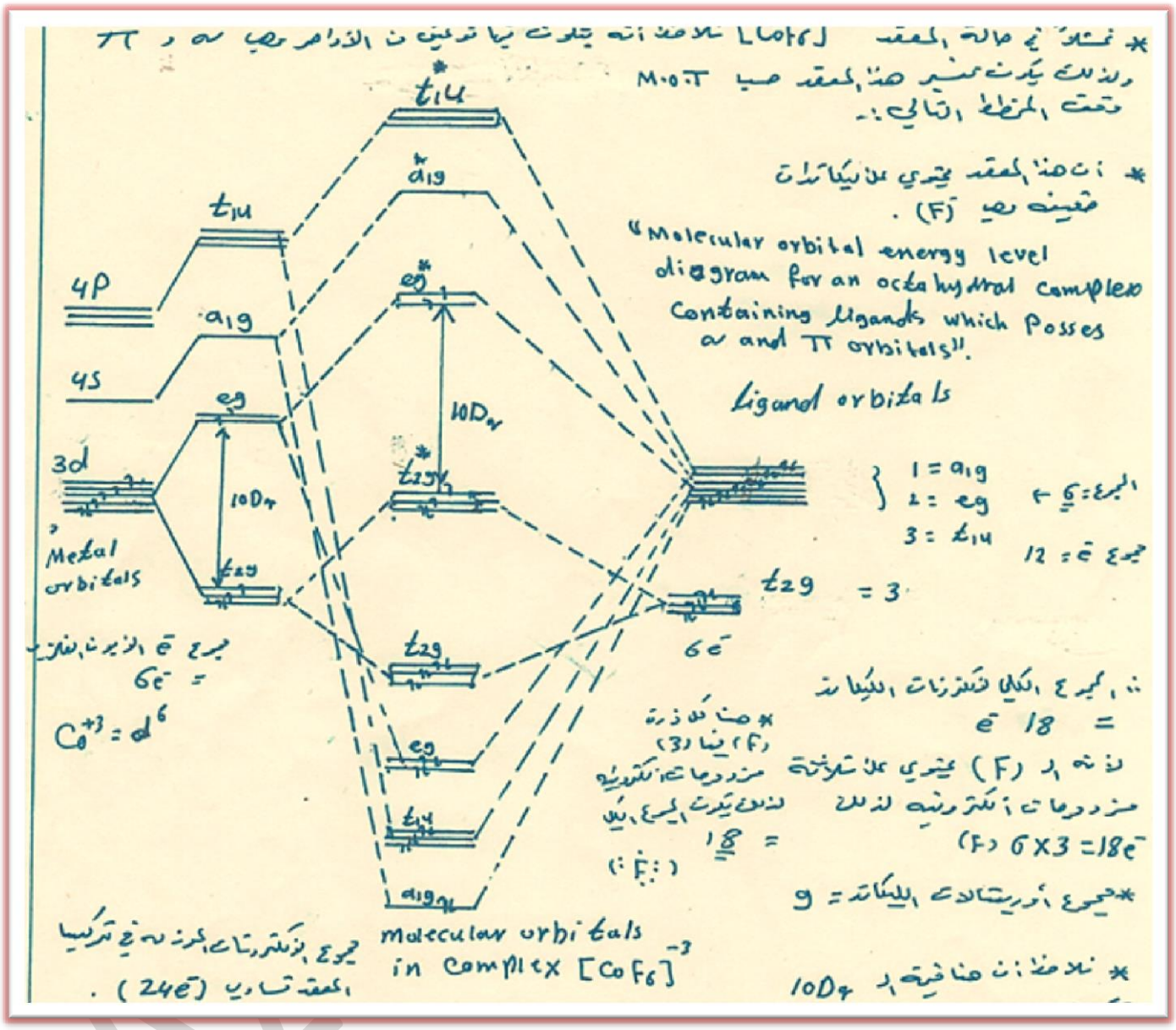
لو اخذنا المعقد $[CoF_6]^{-3}$ يحتوي هذا المعقد على **18** الكترون وهما (12) الكترون متأتية من الليكاندات **F** أما (6) الالكترونات المتبقية اتية من أيون الكوبلت Co^{+3} ولذلك تم تفسير هذا المعقد حسب نظرية الاوربيتال الجزيئي (M.O.T) يكون المخطط بالشكل التالي : وتدعى الليكاندات المانحة لكل من سكما σ وباي π وهناك انواع اخرى منها X^- ، SO_4^{2-} وغيرها .

الترتيب الالكتروني للكوبلت

$_{27}Co$ $_{18}[Ar]\ 3d^7\ 4s^2$ in ground state

$_{27}Co^{+3}$ $_{18}[Ar]\ 3d^6\ 4s$ in excited state

Azal Shaker



في المخطط السابق نلاحظ ان قيمة 10 Dq تكون قليلة وذلك لأن اليكاند الموجود في المعقد ليكاند ضعيف لذا يكون المجال ضعيف .

يوجد لدينا (9) اوربيتالات من الايون ألمركزي ولدينا (9) اوربيتالات من اليكاند فيكون المجموع الكلي للاوربيتالات الذرية هي (18) اوربيتال وعند امتزاجها مع بعض تعطي (18) اوربيتال جزيئي تسع

اوربيتالات تكون متآصره Bonding Molecular Orbital وخمسة anit-bondnig تتوزع هذه الالكترونات على الاوربيتالات حسب طاقتها فكل اوربيتال يملئ بإلكترونيين .

بما أن 10 Dq < PT نلاحظ ان الالكترونات لا تزدوج لان اليكاند ضعيف . كذلك نلاحظ من المخطط اعلاه أن ثلاثة من الليكاندات بالإضافة الى تكوينها أصرة σ فأنها تحتوي على ثلاثة اوربيتالات P ممتلئة فتتكون اواصر من نوع π .

لحساب رتبة الاصرة :

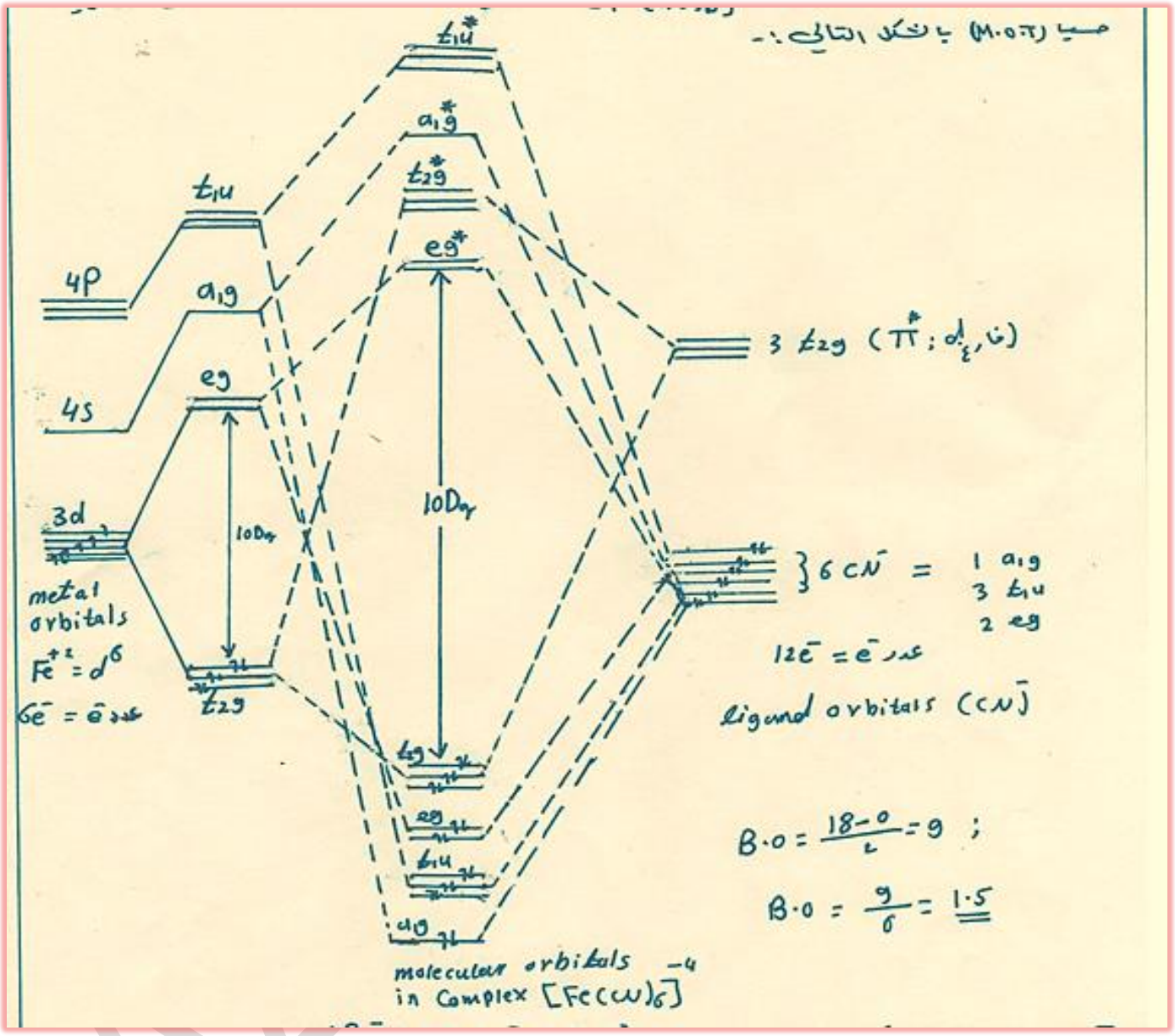
$$\text{Bond order} = \frac{\text{no. of electron in B.MO} - \text{no. of A.BM.O}}{2}$$

= 18-6 / 2 ⟶ 6

بعد ذلك نقسم رتبة الاصرة على عدد اليكاندات الموجودة في المعقد بمعنى ان رتبة الاصرة للمعقد تساوي واحد . يتبين أن المعقد اعلاه يمتلك صفة بارا مغناطيسية وذلك بسبب وجود الالكترونات منفردة في الاوربيتال t_2g و eg .

لو اخذنا معقد أخر يحتوي على ليكاندات لها القابلية على تكوين اواصر سكما وباي اي بمعنى ليكاندات مانحة لأصرة سكما σ ومستقبلة π مثال على ذلك CO ، R_3S ، R_3P

يكون شكل المخطط كالتالي : $[Fe(CN)_6]^{-4}$



مجموع الالكترونات في المعقد 18 ، أن قيمة 10 Dq كبيرة تكون بين مستويين الاول يحتوي على ثلاث اوربيتالات t_2g والاخر يحتوي على اوربيتالين **eg*** وان هذه الحالة فقط في معقدات ثمانية السطوح .