

אורביטלים מולקולריים



תיאוריית האורביטלים המולקולריים, MO 

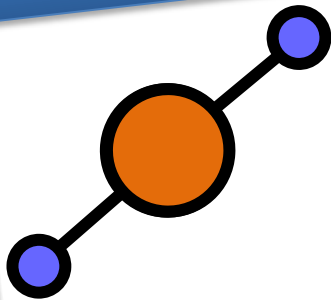
אורביטלים מולקולריים עבור מולקולות 

דו אטומיות

סדר קשר 

אורביטלי HOMO ו- LUMO 

מה אנחנו צריכים כבר לדעת?



אורביטלים אטומיים 

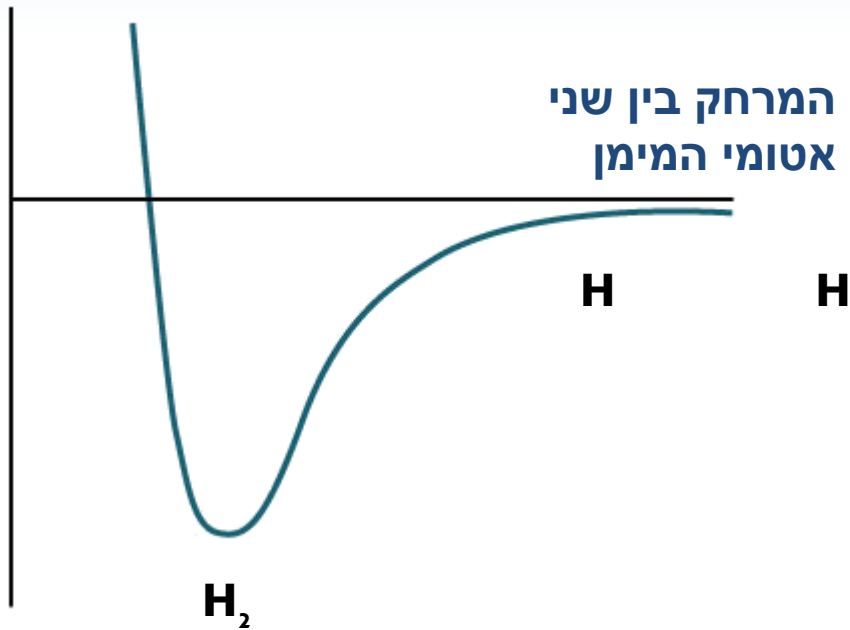
אכלוס אלקטרונים באטומים 
עקרון פאולי, כלל הונד

אופני רישום של היערכות אלקטרונית 

היווצרות מולקולת מימן, H_2

אנרגיה

איור: מריה גורחובסקי



כאשר שני אטומי מימן 

נמצאים במרחק רב זה מזה
אין ביניהם כוחות משיכה או
דחייה.

כשהם מתקרבים זה לזה יש 
כוחות משיכה בין גרעין אטום
אחד לאלקטרונים של אטום
שני והאנרגיה הפוטנציאלית
של המערכת יורדת.

האנרגיה הפוטנציאלית היא מינימלית כשנוצר הקשר הקוולנטי 
ומתקבלת המולקולה H_2 .

יש רווח אנרגטי שהוא הכוח המניע להיווצרות המולקולה.

כאשר אטומי המימן מתקרבים עוד יותר זה לזה, כוחות הדחייה בין 
הגרעינים מתגברים וגורמים לעלייה באנרגיה הפוטנציאלית.

מהי תיאוריית האורביטלים המולקולריים?

לא תמיד כששני אטומים מתקרבים אחד לשני נוצר ביניהם קשר .

לדוגמה, כששני אטומי הליום מתקרבים אחד לשני לא נוצרת המולקולה He_2 .

תיאוריית האורביטלים המולקולריים היא מודל המסביר את המבנה האלקטרוני של מולקולות.

המודל מאפשר לצפות מראש את היציבות היחסית של מולקולות (האם מולקולה נוצרת או לא), את המבנה המרחבי שלהן, האם החומר בולע קרינה בתחום הנראה (ולכן הוא חומר צבעוני) ועוד.

ע"פ מודל זה האלקטרונים במולקולה נמצאים ב**אורביטלים מולקולריים (MO)**.

אורביטל מולקולרי ממוקם סביב שני גרעינים של אטומים (או יותר) במולקולה, ולא סביב אטום אחד כמו אורביטל אטומי.

לכל מולקולה יש מערך אורביטלים מולקולריים משלה כמו שלכל אטום בודד יש מערך אורביטלים אטומיים משלו.

האורביטלים המולקולריים נוצרים מחיבור וחסור של אורביטלים אטומיים של האטומים הנקשרים זה לזה.

יצירת אורביטלים מולקולריים מאורביטלים אטומיים

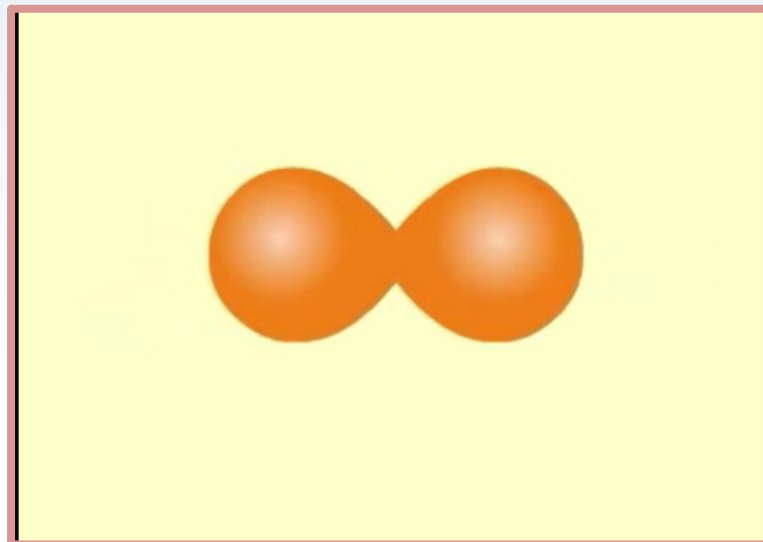
ישנם מספר כללים ליצירת אורביטלים מולקולריים
מאורביטלים אטומיים:

האורביטלים האטומיים צריכים להיות בעלי אנרגיה דומה 

האורביטלים האטומיים צריכים להיות בעלי סימטריה
דומה 

בין האורביטלים האטומיים צריכה להיווצר חפיפה טובה 

נצפה בסרטון



היווצרות שני אורביטלים מולקולריים על ידי חיבור וחסור של שני אורביטלי s של שני אטומי מימן

[https://www.cengage.com/chemistry/discipline_content/dvd/Power_Lectures/General_Chemistry/dswmedia/hmswf/mov/sigma_bond_antibond_orbitals](https://www.cengage.com/chemistry/discipline_content/dvd/Power_Lectures/General_Chemistry/dswmedia/hmswf/mov/sigma_bond_antibond_orbitals.mov)
[.mov](#)

היווצרות אורביטלים מולקולריים מאורביטלים אטומיים

דוגמאות להיווצרות אורביטלים מולקולריים מחיבור ומחיסור של אורביטלים אטומיים:



חיבור של שני אורביטלי s



חיסור של שני אורביטלי s

כמה דוגמאות נוספות של היווצרות אורביטליים מולקולריים

חיבור של אורביטל s לאורביטל $2p_x$



חיבור של שני אורביטלי $2p_x$, "ראש לראש"



חיבור של שני אורביטלי $2p_z$, "צד לצד"

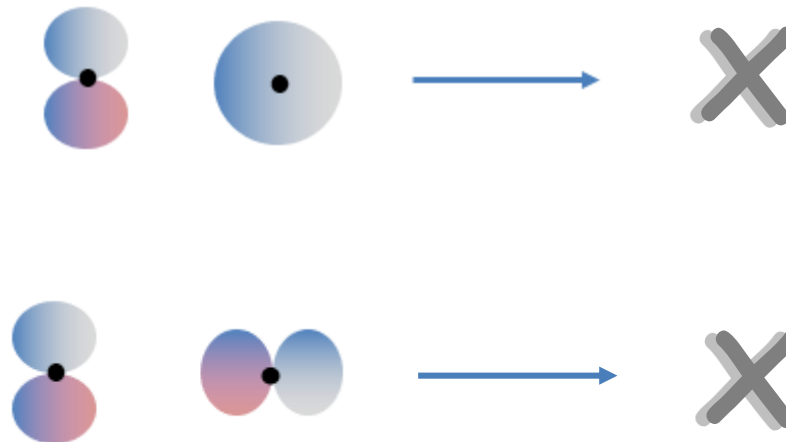


חיסור של שני אורביטלי $2p_z$, "צד לצד"



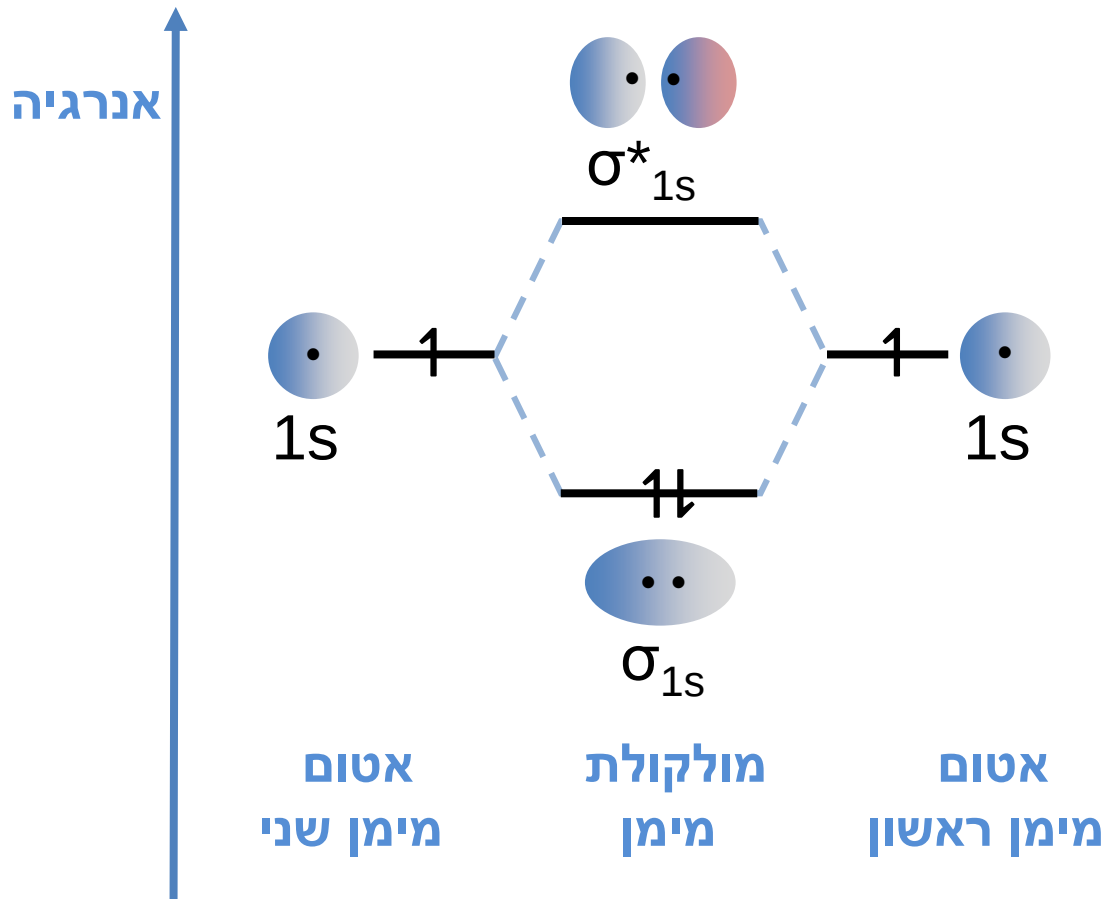
היווצרות אורביטלים מולקולריים מאורביטלים אטומיים - המשך

לא נוצר אורביטל מולקולרי בין אורביטל s לאורביטל p_z ,
למשל, או בין אורביטל p_x לאורביטל p_z .
הסימטריה (הצורה המרחבית) של שני האורביטלים
האטומיים אינה מאפשרת חפיפה טובה ביניהם.



אורביטלים מולקולריים של מולקולת מימן, H_2

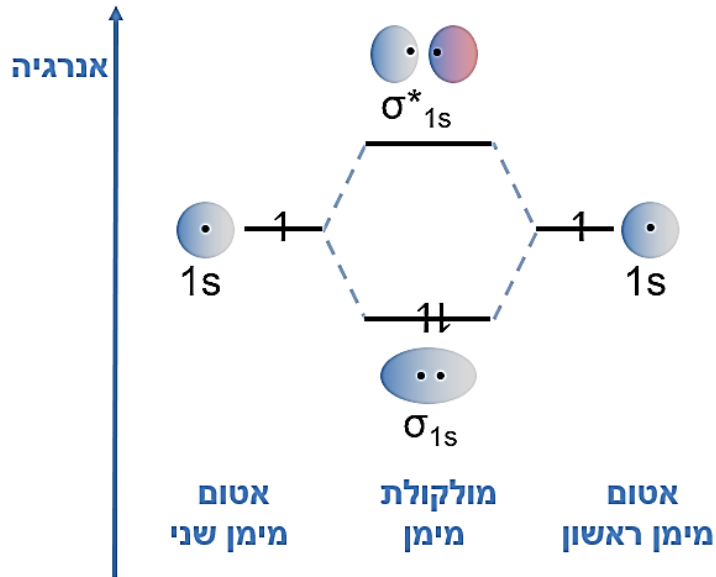
בדיאגרמת רמות האנרגיה נראים בצדדים האורביטלים האטומיים של שני אטומי מימן נפרדים, ובאמצע - האורביטלים המולקולריים שנוצרים מהם.



מחיבור וחיסור של שני אורביטלי $1s$ של שני אטומי המימן מתקבלים שני אורביטלים מולקולריים: אחד בעל אנרגיה נמוכה יותר מהאנרגיה של אורביטלי ה- $1s$, ואחד בעל אנרגיה גבוהה יותר מהאנרגיה של שני אורביטלי ה- $1s$.

אורביטלים מולקולריים של מולקולת מימן, H_2 - המשך

האורביטלים המולקולריים מסומנים באות היוונית σ (סיגמא).
הסימול $1s$ מופיע לצד ה- σ מכיוון שאורביטלים מולקולריים אלה נוצרו מאורביטלי $1s$ אטומיים.



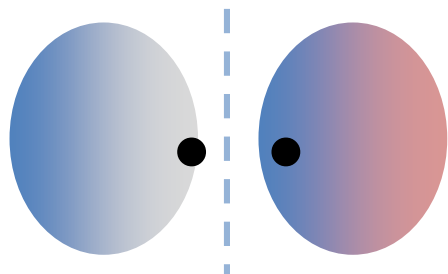
האורביטל הנמוך באנרגיה נקרא **אורביטל קושר** (bonding orbital). באורביטל מולקולרי זה צפיפות האלקטרונים באזור שבין הגרעינים גדולה.

האורביטל המולקולרי הגבוה באנרגיה נקרא **אורביטל אנטי קושר** (antibonding orbital). באורביטל מולקולרי זה צפיפות האלקטרונים באזור שבין הגרעינים קטנה. אורביטל אנטי קושר מסומן בכוכבית *.

שני האלקטרונים שהיו באורביטלי $1s$ האטומיים מאכלסים את האורביטל המולקולרי σ_{1s} בעל האנרגיה הנמוכה יותר.

אורביטל קושר ואורביטל אנטי-קושר

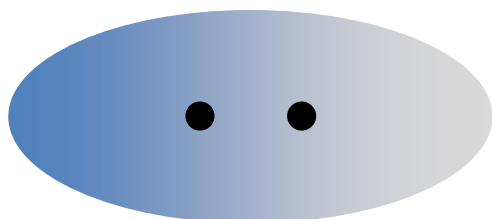
מישור צומת



σ_{1s}^*

לִאֲוֹרְבִיטַל הַקּוֹשֵׁר אֵנֶרְגִיָּה נִמּוּכָה מִזֹּו
שֶׁל הָאֲוֹרְבִיטַל הָאֲנְטִי-קוֹשֵׁר.

בִּאֲוֹרְבִיטַל הָאֲנְטִי-קוֹשֵׁר, σ_{1s}^* , קִיִּים **מִישׁוֹר**
צוּמָת בֵּין גִּרְעִינֵי הָאֲטוֹמִים הַקְּשׁוּרִים.



σ_{1s}

כָּכֵל שִׁישׁ בִּאֲוֹרְבִיטַל יוֹתֵר מִישׁוּרֵי צוּמָת
הָאֵנֶרְגִיָּה שֶׁלּוֹ גְּבוּהָה יוֹתֵר.

כללים לאכלוס אורביטלים מולקולריים

כללי האכלוס של אורביטלים מולקולריים דומים לכללי האכלוס של אורביטלים אטומיים.

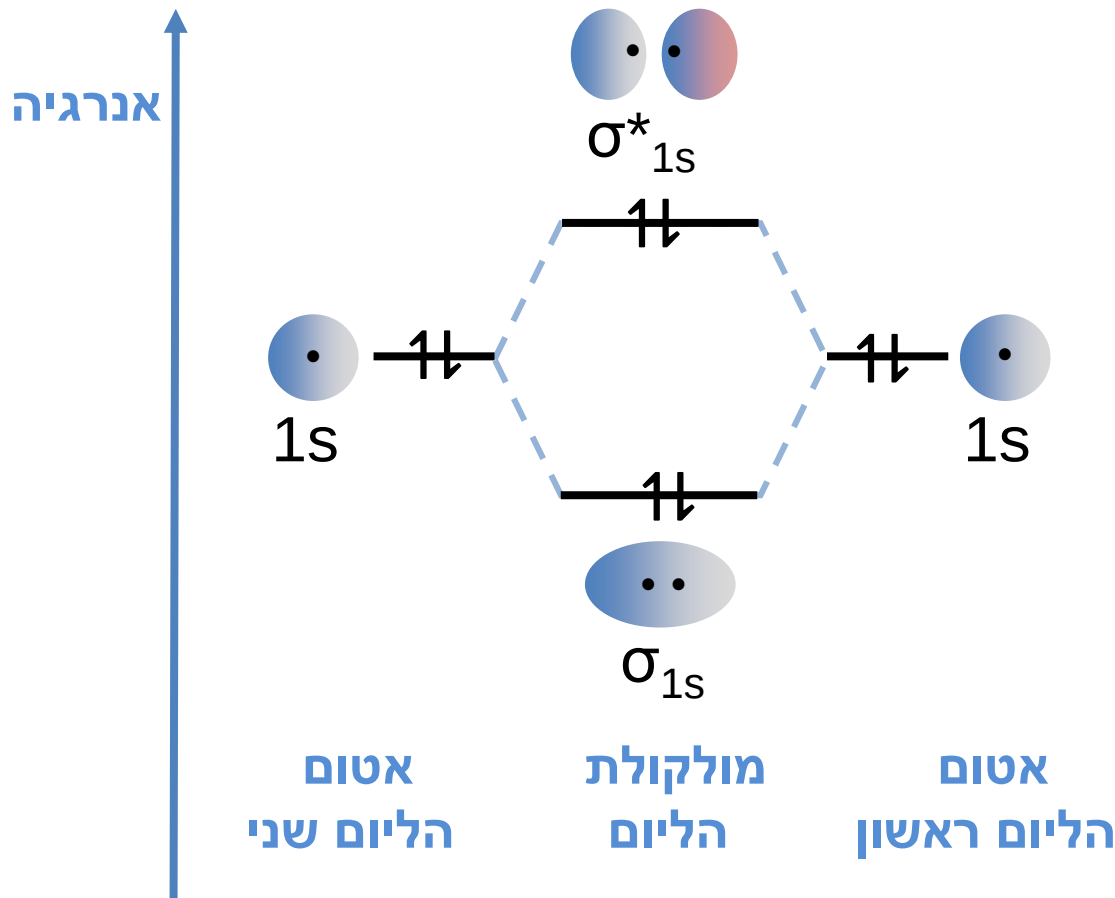
מאכלסים את האורביטלים המולקולריים באלקטרונים החל מהאורביטל בעל האנרגיה הנמוכה ביותר.

בכל אורביטל אפשר לאכלס עד שני אלקטרונים בעלי ספין הפוך (ע"פ עקרון פאולי)

באורביטלים מנוונים (בעלי אנרגיה זהה) מאכלסים אלקטרון אחד בכל אורביטל לפני שמוסיפים את האלקטרון השני (ע"פ כלל הונד)

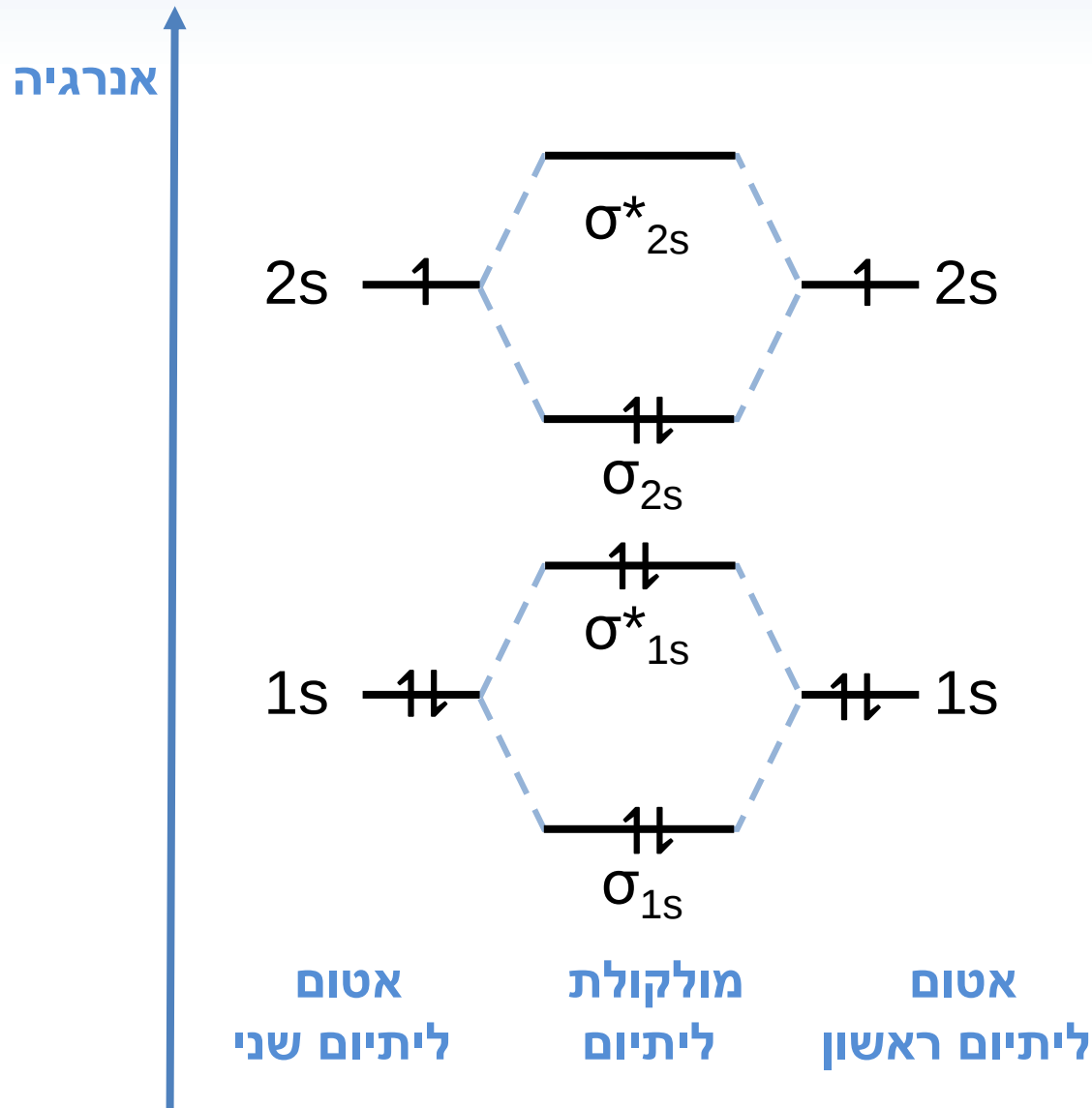
יציבות של מולקולות דו-אטומיות הומונוקליאריות

במולקולה H_2 שני האלקטרונים מאכלסים את אורביטל σ_{1s} הנמוך יותר באנרגיה. נוצר **רווח אנרגטי** ולכן המולקולה יציבה.



לעומת זאת, במולקולה He_2 ארבעת האלקטרונים מאכלסים את אורביטל σ_{1s} הנמוך יותר באנרגיה וגם את אורביטל σ_{1s}^* הגבוה יותר באנרגיה. לא נוצר **רווח אנרגטי** ולכן המולקולה אינה יציבה.

האם המולקולה Li_2 יציבה?

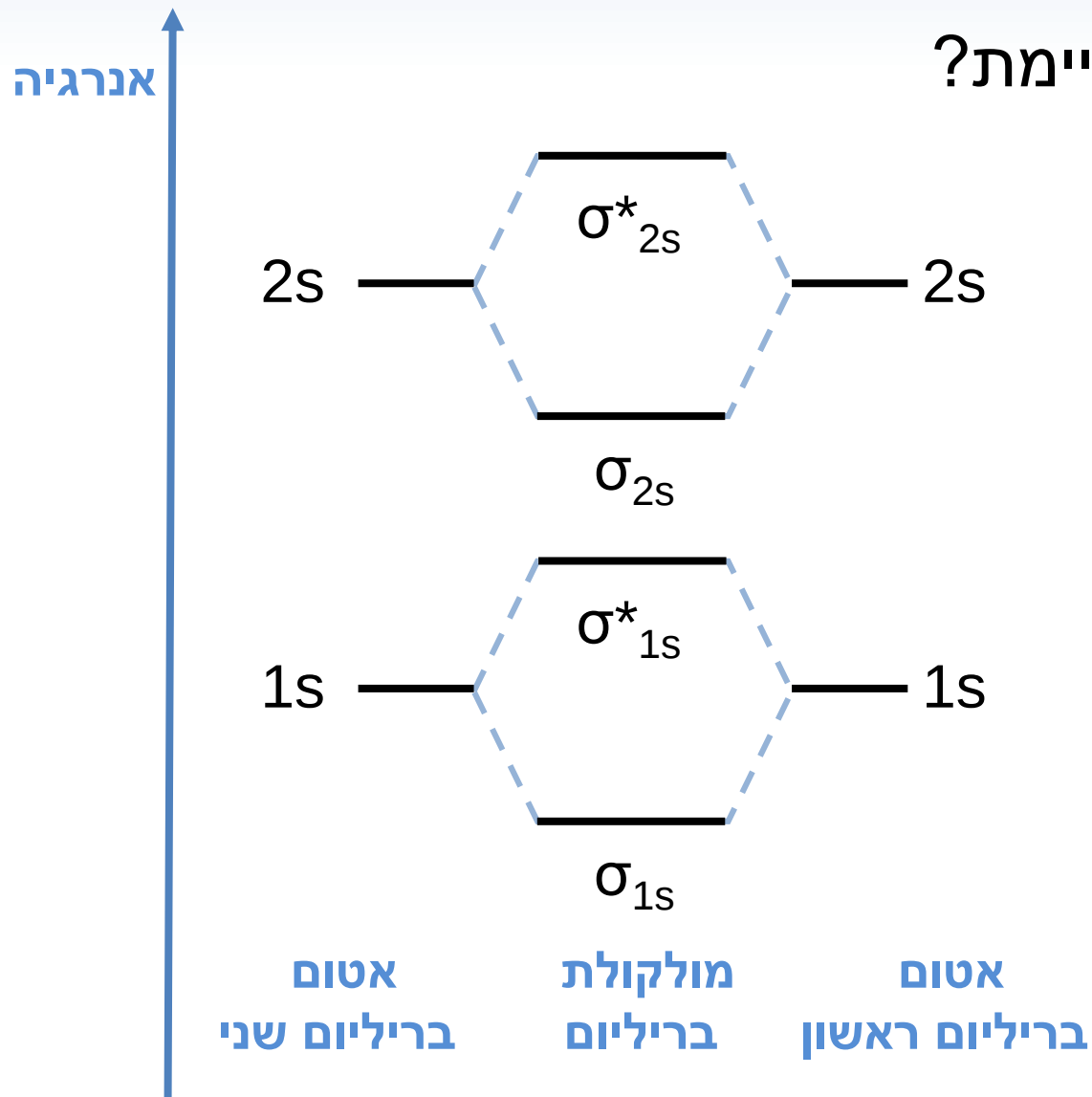


היערכות האלקטרונים
של כל אטום ליתיום היא
 $1s^2 2s^1$.

גם מאורביטלי $2s$
נוצרים שני אורביטלים
מולקולריים: σ_{2s} ו- σ^*_{2s} .

נוצר **רווח אנרגטי** ולכן
המולקולה יציבה ואפשר
למצוא מולקולות כאלה
בפאזה הגזית.

האם המולקולה Be_2 קיימת?

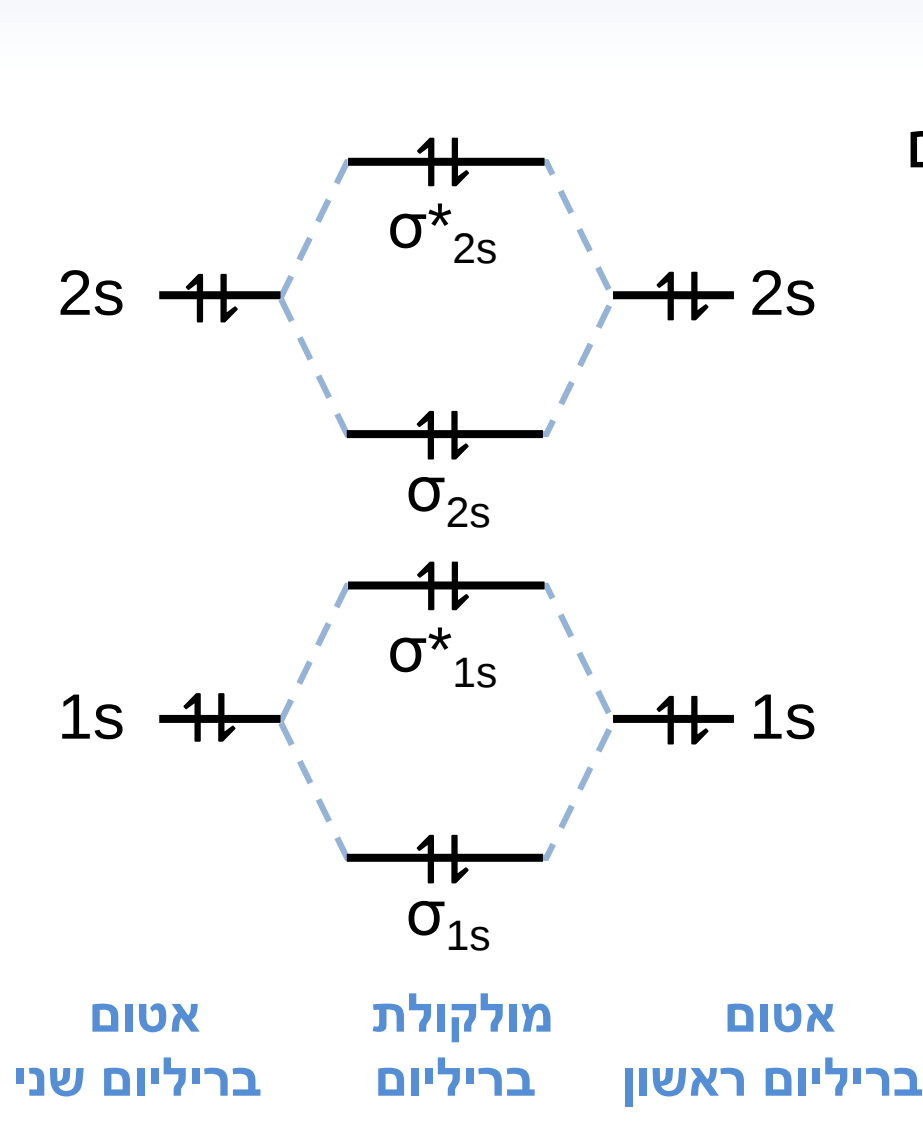


תרגיל 1 - פתרון

לא. היערכות

האלקטרונים של כל אטום
ברליום היא $1s^2 2s^2$.

באכלוס האורביטלים
המולקולריים אין רווח
אנרגטי ולכן המולקולה
אינה יציבה.



שימו לב: היערכות
האלקטרונים של Be_2
היא: $\sigma_{1s}^2 \sigma_{1s}^{*2} \sigma_{2s}^2 \sigma_{2s}^{*2}$

האם המולקולות B_2 , C_2 , N_2 , O_2 , F_2 , Ne_2 יציבות?

כדי לבדוק מולקולות דו-אטומיות בהמשך השורה הראשונה בטבלה המחזורית יש צורך להתייחס גם לאורביטלים מולקולריים שנוצרים מחיבור וחיסור אורביטלי $2p$.

1 H Hydrogen 1.008																	2 He Helium 4.002602																			
3 Li Lithium 6.94	4 Be Beryllium 9.01224															5 B Boron 10.81	6 C Carbon 12.011	7 N Nitrogen 14.007	8 O Oxygen 15.999	9 F Fluorine 18.998403163	10 Ne Neon 20.1797															
11 Na Sodium 22.98976928	12 Mg Magnesium 24.305															13 Al Aluminium 26.9815385	14 Si Silicon 28.085	15 P Phosphorus 30.973761998	16 S Sulfur 32.06	17 Cl Chlorine 35.45	18 Ar Argon 39.948															
19 K Potassium 39.0983	20 Ca Calcium 40.078	21 Sc Scandium 44.955912	22 Ti Titanium 47.88	23 V Vanadium 50.9415	24 Cr Chromium 51.9961	25 Mn Manganese 54.938044	26 Fe Iron 55.845	27 Co Cobalt 58.933194	28 Ni Nickel 58.6934	29 Cu Copper 63.546	30 Zn Zinc 65.38	31 Ga Gallium 69.723	32 Ge Germanium 72.630	33 As Arsenic 74.921595	34 Se Selenium 78.971	35 Br Bromine 79.904	36 Kr Krypton 83.798																			
37 Rb Rubidium 85.4678	38 Sr Strontium 87.62	39 Y Yttrium 88.90584	40 Zr Zirconium 91.224	41 Nb Niobium 92.90637	42 Mo Molybdenum 95.94	43 Tc Technetium 98	44 Ru Ruthenium 101.07	45 Rh Rhodium 102.90550	46 Pd Palladium 106.42	47 Ag Silver 107.8682	48 Cd Cadmium 112.411	49 In Indium 114.818	50 Sn Tin 118.710	51 Sb Antimony 121.757	52 Te Tellurium 127.60	53 I Iodine 126.90447	54 Xe Xenon 131.29																			
55 Cs Cesium 132.90545196	56 Ba Barium 137.327	57 - 71 Lanthanoids		72 Hf Hafnium 178.49	73 Ta Tantalum 180.94788	74 W Tungsten 183.84	75 Re Rhenium 186.207	76 Os Osmium 190.23	77 Ir Iridium 192.222	78 Pt Platinum 195.084	79 Au Gold 196.966569	80 Hg Mercury 200.59	81 Tl Thallium 204.38	82 Pb Lead 207.2	83 Bi Bismuth 208.98040	84 Po Polonium (209)	85 At Astatine (210)	86 Rn Radon (222)																		
87 Fr Francium (223)	88 Ra Radium (226)	89 - 103 Actinoids		104 Rf Rutherfordium (261)	105 Db Dubnium (262)	106 Sg Seaborgium (266)	107 Bh Bohrium (264)	108 Hs Hassium (277)	109 Mt Meitnerium (268)	110 Ds Darmstadtium (285)	111 Rg Roentgenium (281)	112 Cn Copernicium (285)	113 Nh Nihonium (284)	114 Fl Flerovium (289)	115 Mc Moscovium (288)	116 Lv Livermorium (293)	117 Ts Tennessine (294)	118 Og Oganesson (294)																		
57 La Lanthanum 138.90547	58 Ce Cerium 140.12	59 Pr Praseodymium 140.90766	60 Nd Neodymium 144.242	61 Pm Promethium (145)	62 Sm Samarium 150.36	63 Eu Europium 151.964	64 Gd Gadolinium 157.25	65 Tb Terbium 158.92535	66 Dy Dysprosium 162.50	67 Ho Holmium 164.93033	68 Er Erbium 167.259	69 Tm Thulium 168.93422	70 Yb Ytterbium 173.045	71 Lu Lutetium 174.967																						
89 Ac Actinium (227)	90 Th Thorium 232.0377	91 Pa Protactinium 231.03688	92 U Uranium 238.02891	93 Np Neptunium (237)	94 Pu Plutonium (244)	95 Am Americium (243)	96 Cm Curium (247)	97 Bk Berkelium (247)	98 Cf Californium (251)	99 Es Einsteinium (252)	100 Fm Fermium (257)	101 Md Mendelevium (258)	102 No Nobelium (259)	103 Lr Lawrencium (260)																						

יצירת אורביטלים מולקולריים מאורביטלים אטומיים $2p$

שלושת אורביטלי $2p$ האטומיים זהים זה לזה, אך כאשר מחברים ומחסרים אותם נוצרים אורביטלים מולקולריים מסוגים שונים.

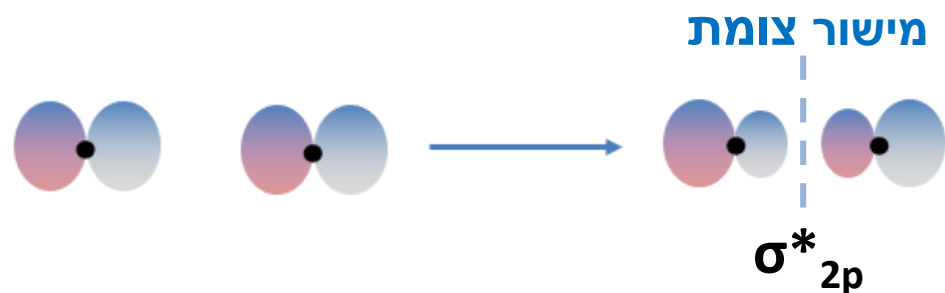
אורביטלי $2p_x$ נמצאים על הציר המחבר את שני גרעיני האטומים.

חיבור בין שני אורביטלי $2p_x$, "ראש לראש"



אורביטל קושר –
צפיפות האלקטרונים
בין גרעיני האטומים
גדולה

אורביטל $2p_x$



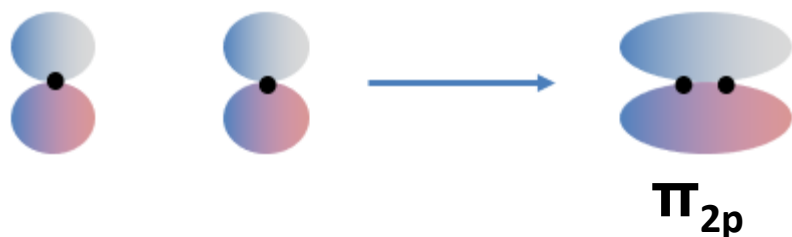
אורביטל אנטי קושר –
צפיפות האלקטרונים
בין גרעיני האטומים
קטנה

אורביטל $2p_x$

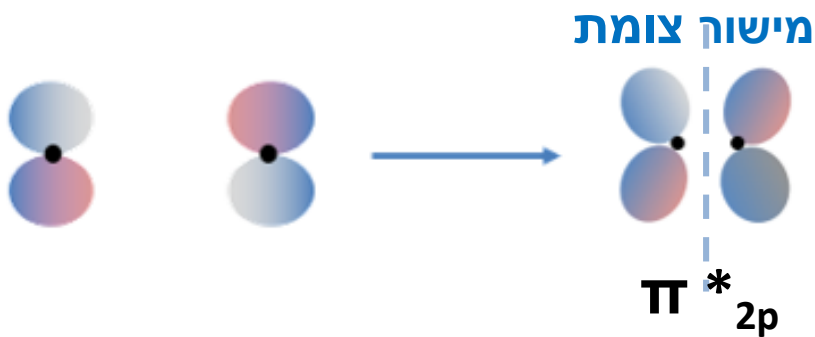
יצירת אורביטלים מולקולריים מאורביטלים אטומיים $2p$ - המשך

אורביטלי $2p_y$ או $2p_z$ ניצבים לציר המחבר את שני גרעיני האטומים.
חיבור בין שני אורביטלי p_y או p_z , "צד לצד"

חיבור בין שני אורביטלי p_y או p_z



אורביטל קושר –
צפיפות האלקטרונים
בין גרעיני האטומים
(מעל ומתחת)



אורביטל אנטי קושר –
צפיפות האלקטרונים
בין גרעיני האטומים
קטנה

השוואה בין אורביטלי σ לאורביטלי π

אורביטלי σ נוצרים מחפיפה של אורביטלים אטומיים "ראש לראש" (s או $2p_x$).

אורביטלי π נוצרים מחפיפה של אורביטלי $2p$ "צד לצד".

חפיפת "ראש לראש" טובה יותר מחפיפת "צד לצד" ויוצרת קשר חזק יותר.

אורביטלי σ סימטריים סביב הציר המחבר את גרעיני האטומים.

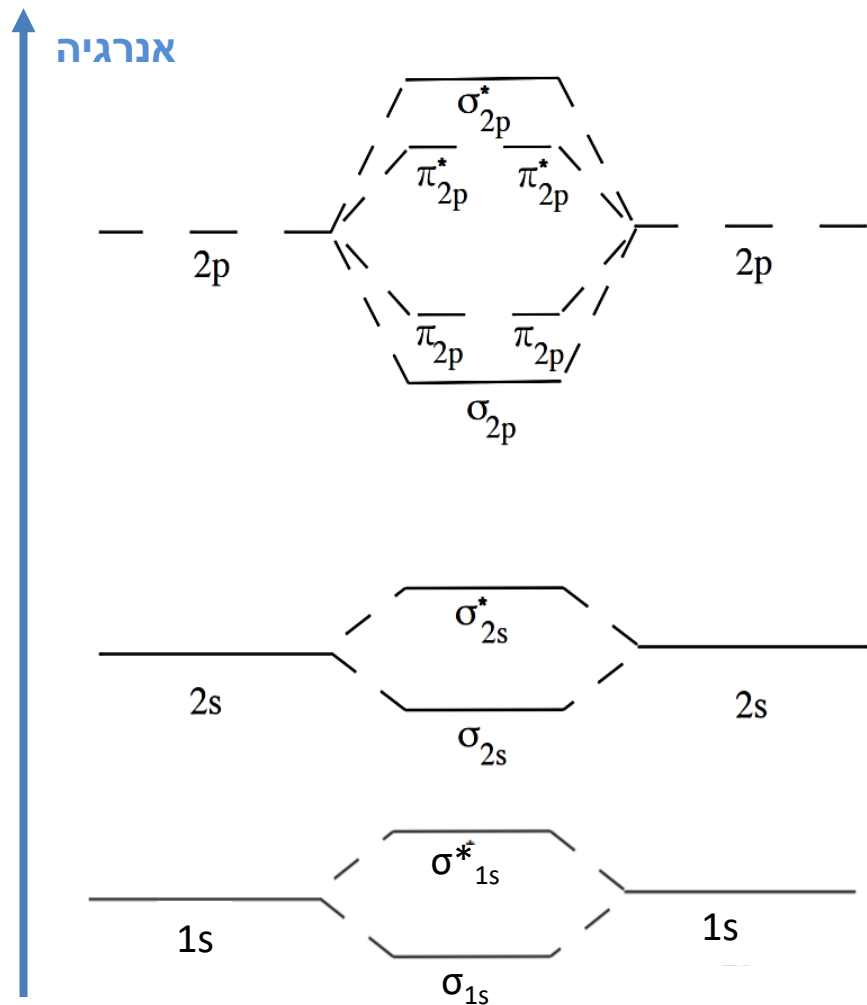


באורביטלים הקושרים σ צפיפות האלקטרונים המרבית היא בין גרעיני האטומים, על הציר המקשר ביניהם.

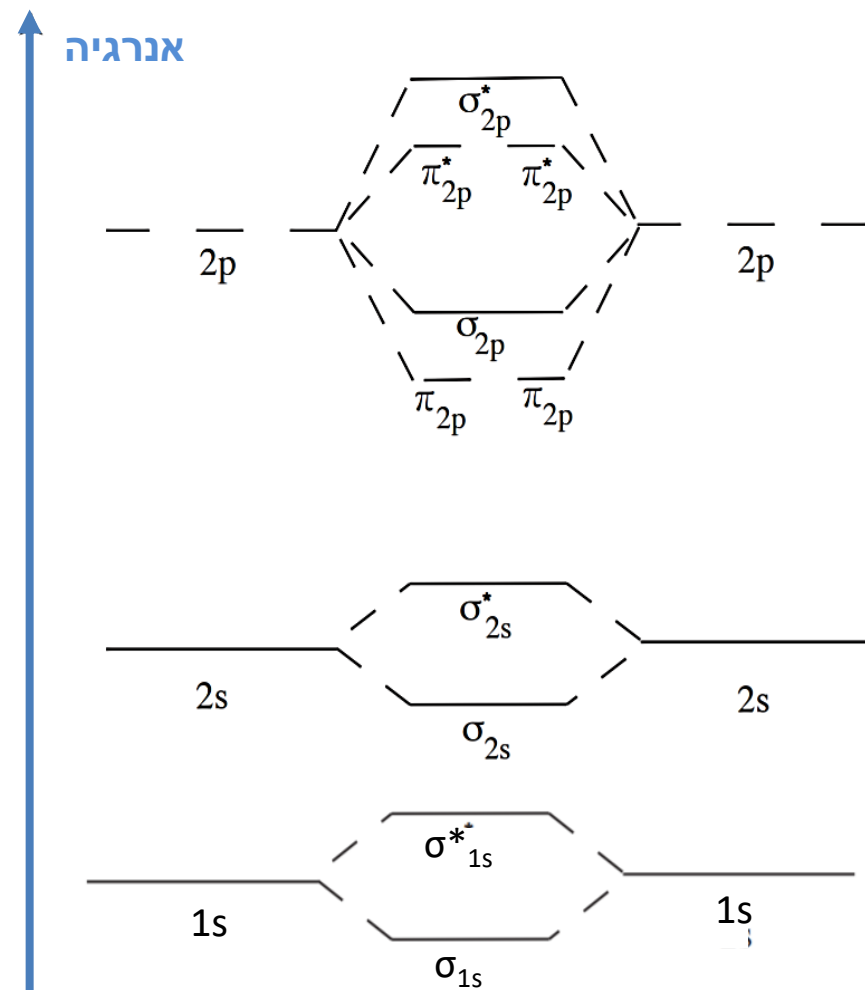
באורביטלים הקושרים π צפיפות האלקטרונים המרבית היא בין גרעיני האטומים, מעל ומתחת לציר המקשר.

דיאגרמות רמות אנרגיה למולקולות דו-אטומיות בשורה הראשונה

תרשים א' עבור O_2 , F_2 , Ne_2



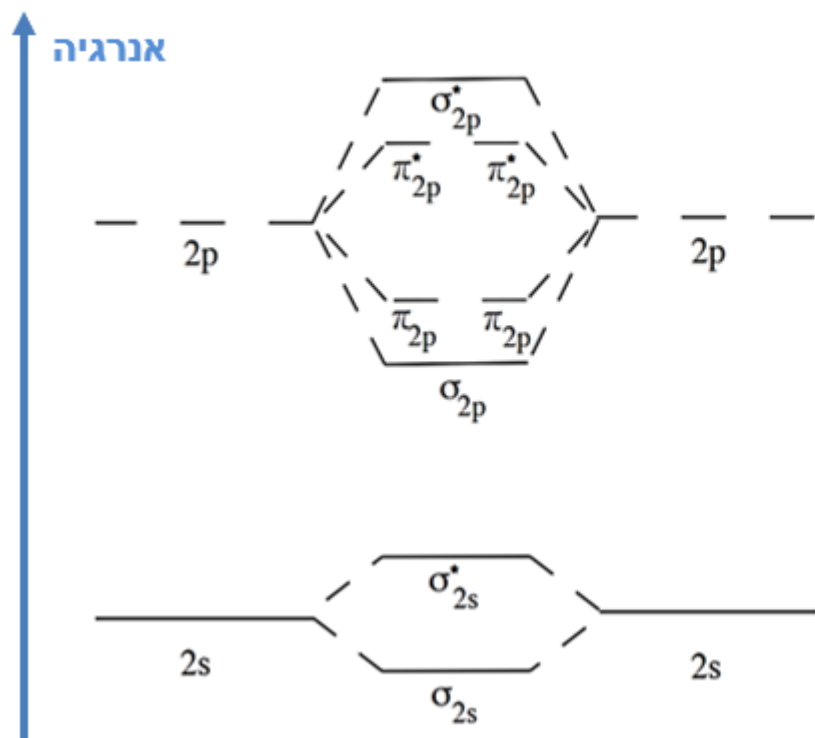
תרשים ב' עבור B_2 , C_2 , N_2



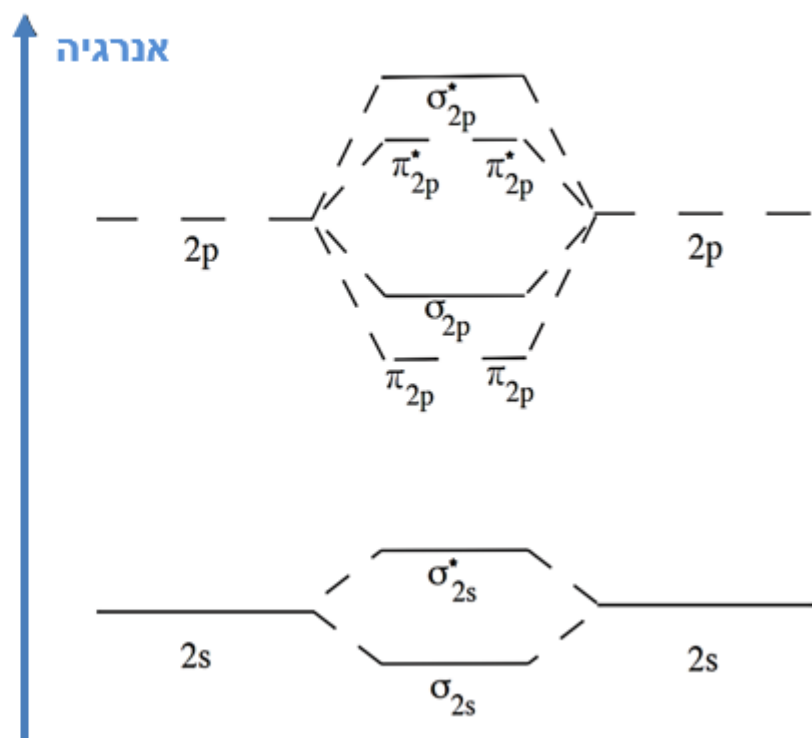
דיאגרמות רמות אנרגיה למולקולות דו-אטומיות בשורה הראשונה

הדיאגרמות מופיעות בספרי הלימוד ובדף הנוסחאות של היחידה ללא אורביטלי σ_{1s} ו- σ_{1s}^* ויש לזכור שגם אורביטלים אלה מאוכלסים באלקטרונים.

תרשים א' עבור O_2, F_2, Ne_2

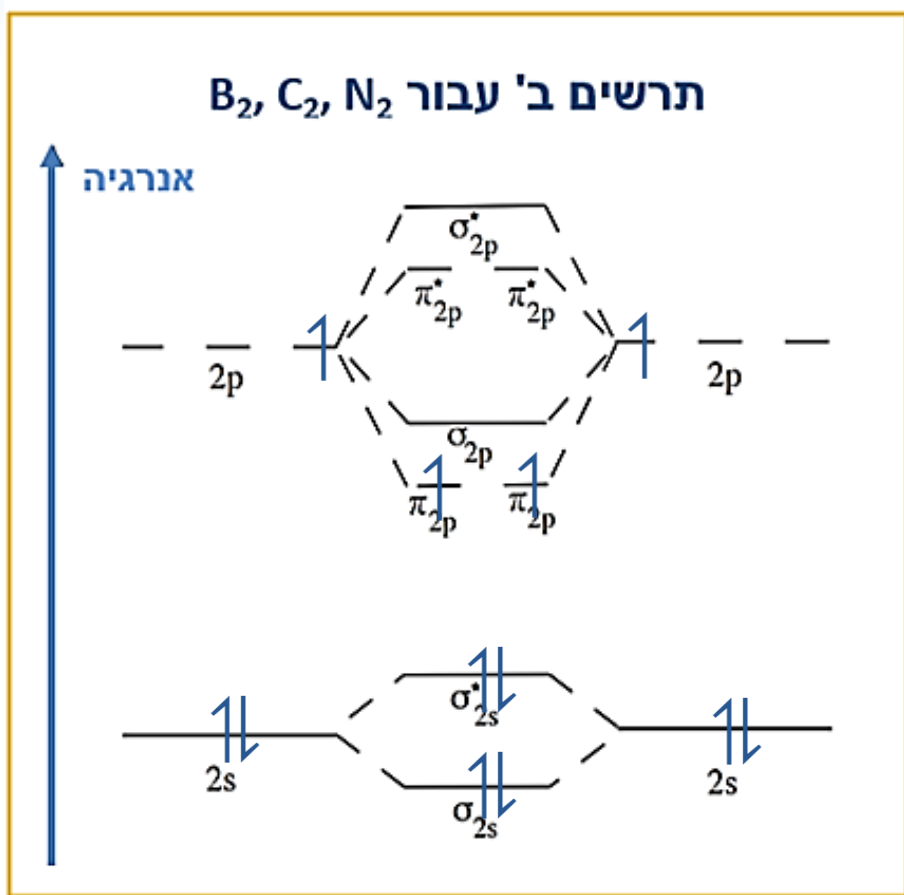


תרשים ב' עבור B_2, C_2, N_2



רשמו את היערכות האלקטרונים של המולקולה B_2 .
העזרו בדף הנוסחאות של היחידה.

תרגול 2 - פתרון



בוחרים את התרשים המתאים – תרשים ב', ומאכלסים אותו ב- 10 אלקטרונים (לכל אטום 5 אלקטרונים).

יש לזכור את אורביטלי σ_{1s} ו- σ_{1s}^* שאינם נראים בתרשים.

היערכות האלקטרונים היא: $\sigma_{1s}^2 \sigma_{1s}^{*2} \sigma_{2s}^2 \sigma_{2s}^{*2} \pi_{2p}^1 \pi_{2p}^1$

סדר הקשר הוא **מדד מספרי** המאפשר לצפות את יציבותן היחסית של מולקולות דו אטומיות.

סדר הקשר מחושב על פי הנוסחה:

$$\text{סדר קשר} = \frac{\text{מספר אלקטרונים באורביטלים קושרים} - \text{מספר אלקטרונים באורביטלים אנטי קושרים}}{2}$$

ככל שסדר הקשר גדול יותר המולקולה יציבה יותר וכשסדר הקשר הוא אפס המולקולה אינה יציבה.

מהו סדר הקשר של המולקולה B_2 ושל היון B_2^- ?

ראינו כי היערכות האלקטרונים של המולקולה B_2 היא:



ישנם 6 אלקטרונים באורביטלים קושרים ו- 4 אלקטרונים באורביטלים אנטי קושרים.

$$\text{סדר קשר} = \frac{6 - 4}{2} = 1$$

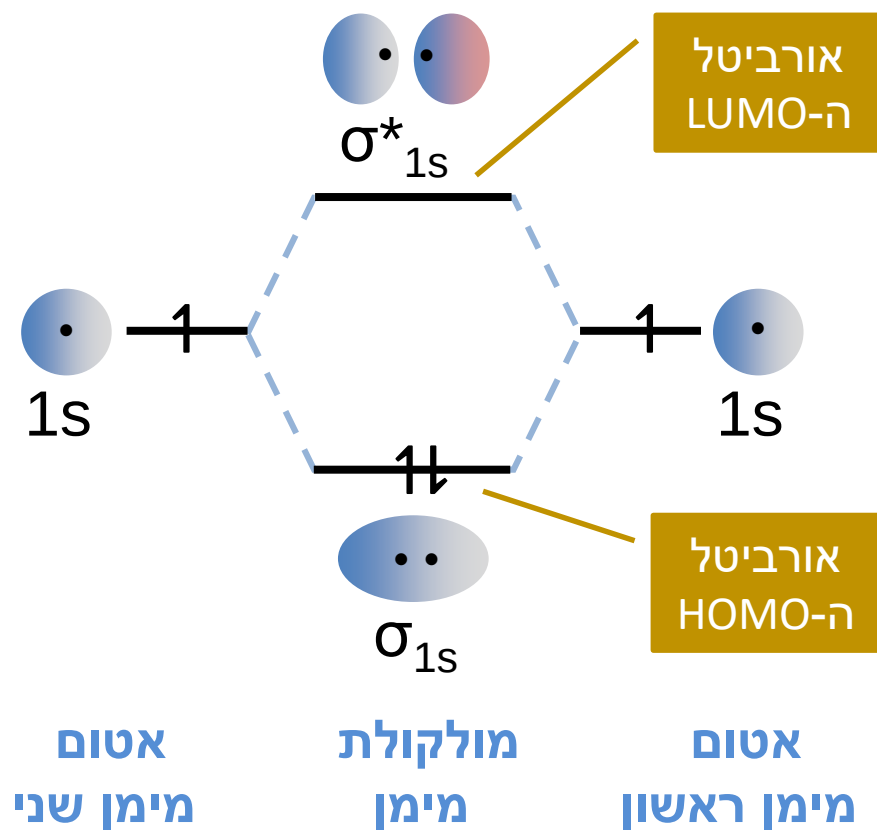
ביון B_2^- יש אלקטרון אחד נוסף. היערכות האלקטרונים היא:
 $\sigma_{1s}^2 \sigma_{1s}^{*2} \sigma_{2s}^2 \sigma_{2s}^{*2} \pi_{2p}^2 \pi_{2p}^1$. האלקטרון הנוסף נמצא באורביטל קושר, ולכן סדר הקשר הוא:

$$\text{סדר קשר} = \frac{7 - 4}{2} = 1.5$$

ליון B_2^- סדר קשר גדול יותר ולכן נדרשת יותר אנרגיה כדי לפרק את הקשר בין שני אטומי הבור.

אורביטלי HOMO ו- LUMO

דוגמה: מולקולת מימן



האורביטל המולקולרי הגבוה ביותר באנרגיה שמאוכלס באלקטרונים נקרא **HOMO** (Highest Occupied Molecular Orbital).

האורביטל המולקולרי שמעליו, שהוא האורביטל הנמוך ביותר באנרגיה שאינו מאוכלס באלקטרונים, נקרא **LUMO** (Lowest Unoccupied Molecular Orbital).

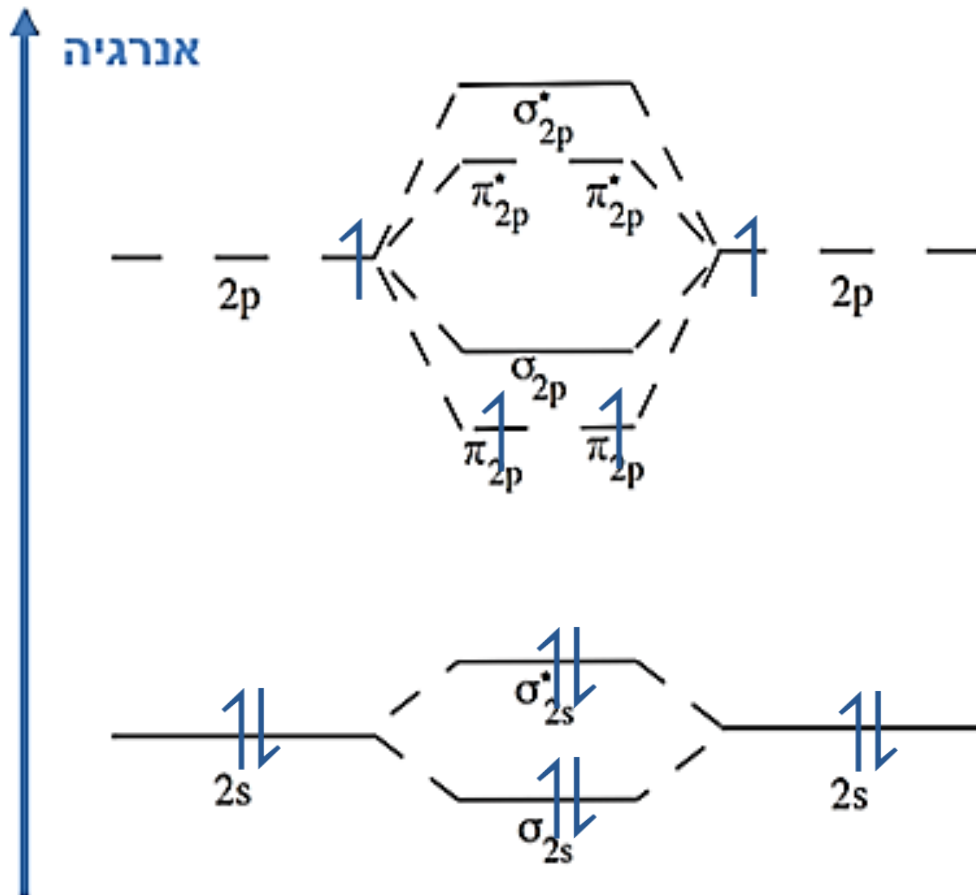
שני אורביטלים אלה נקראים גם אורביטלי החזית (frontier orbitals). הפרש האנרגיה ביניהם מאפשר להבין מנגנונים של תגובות בכימיה ולהסביר את צבעיהם של חומרים מולקולריים.

דוגמה: פעמים רבות חומר מחזר מוסר אלקטרונים שנמצאים באורביטל ה- HOMO לחומר מחמצן שמקבל את האלקטרונים לאורביטל ה- LUMO.

כאשר מעררים מולקולה, בדרך כלל האלקטרונים שנמצאים באורביטל ה- HOMO עולים לרמות גבוהות יותר: אורביטל ה- LUMO או האורביטלים שמעליו.

רשמו מהם אורביטלי ה-HOMO וה-LUMO של
המולקולה B_2 .

תרשים ב' עבור B_2 , C_2 , N_2



אורביטלי ה- HOMO
הם שני אורביטלי π_{2p}
המנוונים.

אורביטל ה- LUMO
הוא האורביטל σ_{2p} .

במולקולה האלקטרונים מאוכלסים באורביטלים מולקולריים שנוצרים מחיבור וחיסור של אורביטלים אטומיים.

אפשר ליצור אורביטלים מולקולריים מאורביטלים אטומיים בעלי אנרגיה דומה וסימטריה המתאימה ליצירת חפיפה טובה.

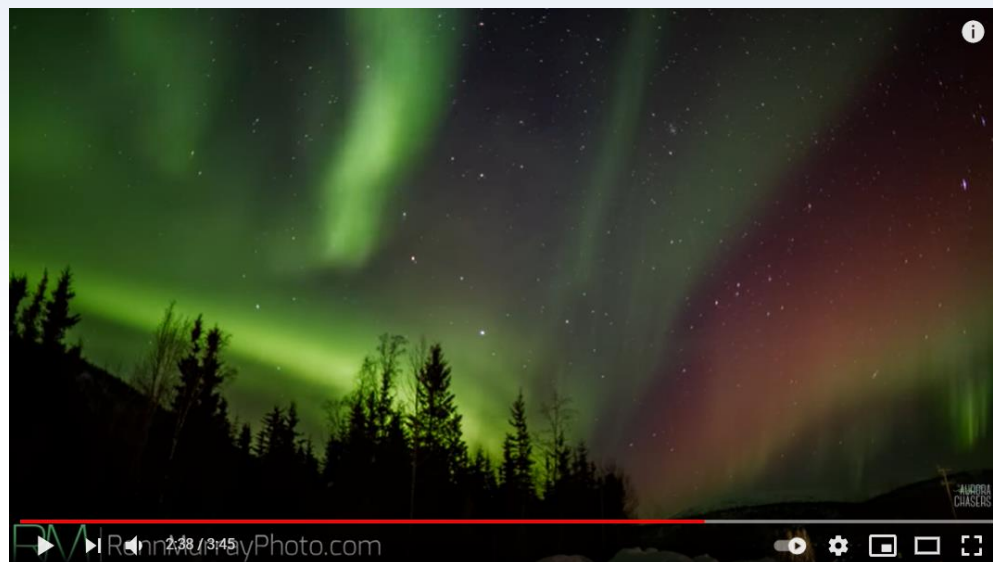
מחיבור וחיסור של שני אורביטלים אטומיים מקבלים שני אורביטלים מולקולריים: קושר ואנטי קושר.

כללי האכלוס של האורביטלים המולקולריים דומים לכללי האכלוס של אורביטלים אטומיים.

סדר קשר הוא מדד מספרי שבעזרתו אפשר לקבוע את היציבות היחסית של מולקולות.

אורביטל HOMO הוא האורביטל המולקולרי הגבוה ביותר באנרגיה שמאכלס באלקטרונים, ואורביטל LUMO הוא האורביטל המולקולרי הנמוך ביותר באנרגיה שאינו מאכלס באלקטרונים.

נצפה בסרטון



הזוהר הצפוני

https://www.youtube.com/watch?v=TLblUQJ6bsY&ab_channel=TheAuroraChasers