مولکولهای دو اتمی که از اتمهای مختلف تشکیل شده‌اند.

این روش در مورد مولکول‌های دو اتمی با اتم‌های ناهمگون که اتم‌های آنها در دوره‌های متفاوت جدول تناوبی قرار دارند نیز به کار می‌رود. به عنوان مثال، مولکول HF را بررسی می‌کنیم. در این مولکول چون فلوئور دارای بار هسته‌ای بیشتری نسبت به هیدروژن است،تراز انرژی کلیه اوربیتال‌های آن پایین‌تر از تراز انرژی اوربیتال $1s$ هیدروژن قرار دارد. در نتیجه انرژی اوربیتال‌های $2s$ و $2p$ فلوئور قابل مقایسه با انرژی اوربیتال $1s$ هیدروژن است. (اوربیتال $1s$ فلوئور کاملاً توسط هسته جذب شده است و در تشکیل پیوند شرکت ندارد.)

علاوه بر این اوربیتال $1s$ هیدروژن دارای تقارن مناسب برای ترکیب با اوربیتال $2s$ یا $2p_z$ جهت تشکیل پیوند s است (در این مولکول محور z، محور مولکولی $H\text{-}F$ فرض شده است.) بهترین همپوشانی بین اوربیتال $1s$ هیدروژن و اوربیتال $2p_z$ فلوئور رخ می‌دهد (از نظر انرژی این دو اوربیتال به هم نزدیک‌ترند). از این همپوشانی یک اوربیتال مولکولی پیوندی، $s_{s,p}$ و یک اوربیتال مولکولی ضدپیوندی $s^*_{s,p}$، ایجاد می‌گردد. اوربیتال‌های ظرفیتی دیگر فلوئور $\left(2p_y, 2p_x, 1s\right)$ غیرپیوندی هستند و جفت الکترون‌ها در این اوربیتال‌ها جای می‌گیرند. به این ترتیب ساختمان الکترونی مولکول HF به صورت زیر خواهد بود:

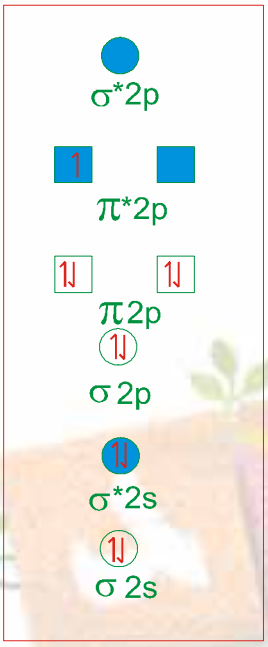
$$H\,(1s)^1 + F\,(2s)^2\,(2p)^5 = HF\left(s_{s,p}\right)^2\left(s^*_{s,p}\right)^0(2s)^2\,(2p_x)^2\left(2p_y\right)^2$$

برای مولکولهای دو اتمی مثل CO و NO، همین نوع اوربیتالهای مولکولی، اما با کمی تغییر، تشکیل می‌شوند.

شبکه رشد – شبکه ملی مدارس ایران
Olympiad.roshd.ir

چون CO با N_2 هم الکترون است (هر دو مولکول ده الکترون والانس دارند)، نمودار تراز انرژی اوربیتال مولکولی CO، مشابه با N_2 است. بنابراین مرتبه پیوند در کربن مونوکسید، سه است. انرژی تفکیک پیوند در مولکول CO تقریباً هم‌اندازه انرژی تفکیک پیوند در مولکول N_2 است.

پیشتر گفته شد که ترسیم ساختار لوویس برای مولکولهایی که تعداد الکترون آنها فرد است، ناممکن است. نیتروژن اکسید، NO، چنین مولکولی است. زیرا پنج الکترون والانس از سوی اتم N و شش الکترون والانس از سوی اتم O به اشتراک گذارده شده‌اند، که تعداد کل الکترون را به یازده می‌رساند. نمودار تراز انرژی اوربیتال‌های مولکولی NO، در شکل مقابل نشان داده شده است. چون در این نمودار، هشت الکترون پیوندی و سه الکترون ضدپیوندی نشان داده شده‌اند، مرتبه پیوند در NO، $1/2(8-3)$ یا $2\frac{1}{2}$ است. نیتروژن اکسید پارامغناطیسی است، زیرا مولکول NO یک الکترون جفت نشده در اوربیتال $p*2p$ دارد.



نمودار تراز انرژی اوربیتال مولکولی برای NO

شبکه رشد – شبکه ملی مدارس ایران
Olympiad.roshd.ir