**Hetero nuclear diatomic molecules**

בבואנו לטפל במולקולות דו-אטומיות הטרו-נוקלאריות כגון מולקולת ה – CO אנו נבנה אורביטלים מולקולאריים () כקומבינציה לינארית של אורביטלים אטומיים () בעלי אנרגיה שונה באופן הבא . וריאציה לינארית תניב, כמו במקרה ההומו-נוקלארי, משוואה סקולרית אשר על-מנת שתניב פתרון לא טריוויאלי יש לאפס את הדטרמיננטה הסקולרית המתקבלת:



ההבדל מן המקרה ההומו-נוקלארי הוא הופעת האיבר . כאשר נפתח משוואה זו נקבל:



או:



פתרון המשוואה ניתן על-ידי:



בכדי לפשט את הדיון נניח כי ניתן להזניח את אינטגרל החפיפה  ונקבל



בתוך השורש השתמשנו בעובדה כי:



ניזכר כי מתקיים



ונגדיר



כאשר  הינה בקירוב האנרגיה הממוצעת בין הרמות. ו -  מתכונתי להפרש הרמות בקירוב.

ונקבל כי



כאשר נקבל כי אין ייצוב כתוצאה מקישור קוולנטי (בקישור יוני נקבל תרומה קולומבית ובנוסף לכך קיימת משיכת ון-דר-וואלס):



EB

EA

Egs

Ees

ובאופן כללי כאשר  מידת הייצוב היא קטנה ביותר. לכן שתי רמות בעלות הפרש אנרגיה  גדול מאוד לא תנבנה ייצוב אנרגתי והאורביטלים המולקולאריים שייווצרו מהן יהיו דומים מאוד באופיים לאורביטלים האטומיים המתאימים.

כאשר  נקבל ייצוב משמעותי במקרה זה דיאגראמת הרמות תיראה באופן הבא:



**מולקולת ה – CO**

הקונפיגורציה האלקטרונית של אטום הפחמן הינה – 1S22S22P2 וזו של אטום החמצן הנה 1S22S22P4. אורביטלי ה – 1S בשני האטומים הינם נמוכים מאוד באנרגיה וקרובים לגרעין. כיוון שאורך הקשר במולקולת CO ארוך מזה שבמולקולת H2 החפיפה בין אורביטלי 1S היא נמוכה ולכן האורביטאלים המולקולאריים שייווצרו מהם יהיו דומים באופיים לאורביטלי 1S האטומיים המקוריים והייצוב שנקבל מהחפיפה שלהם יהיה זניח. כיוון שאטום החמצן בעל מטען גרעיני גדול יותר, האורביטלים האטומיים שלו נמוכים יותר באנרגיה (משיכה קולומבית חזקה יותר של האלקטרונים לגרעין). על כן, נוכל לצייר את דיאגראמת הרמות הבאה עבור הרמות העליונות. סדר הרמות אינו טריוויאלי ומתקבל מתוך פתרון המשוואה הסקולארית עבור כל מערכת.

O

C

2SO

2PO

2PC

2SC

2

2

3

3

1

1

1

1

מוותרים על הסימונים u ו –g כיוון שהמערכת אינה הומו-נוקלארית ועל-כן הסימטריה תחת אינברסיה לא קיימת. מספור הרמות נעשה על-פי סדר הופעתן מלמטה. האורביטל 3 (בעל סימטריה גלילית סביב ציר הקשר) הינו אורביטל ה – HOMO והאורביטלים 1\* הינם אורביטלי ה – LUMO. כפי שניתן לראות, סדר הקשר הינו – 3 – זהו הקשר הכימי החזק ביותר הידוע עם חוזק קשר של – 258kcal/mol . הקונפיגורציה האלקטרונית המולקולארית הינה .

**קשר יוני**

כפי שנאמר מעלה, כאשר  נקבל מידת ייצוב קטנה ביותר ודיאגראמת הרמות תיראה באופן הבא:



אם כל אחד מן האורביטלים האטומיים מכיל אלקטרון בודד אזי בעת יצירת הקשר שני האלקטרונים ישבו ב -  (בעת חישוב המקדמים של ה – MO  נקבל כי  ו - ) כלומר האלקטרון יעבור מהאורביטל האטומי הממוקם סביב אטום B לאורביטל האטומי הממוקם סביב אטום A. דוגמא לכך ניתן לראות ב – Na+Cl- כאשר אנרגיית היינון של ה – Cl הנה *EA*~-13.8 eV וזו של ה - Na הנה  *EB*~-5 eV. הקשר היוני מתייצב עקב המשיכה הקולומבית בין שני היונים שנוצרים – אפקט זה נלקח בחשבון רק באופן מקורב במודל ה – MO בו אנו עוסקים (קיימת תרומה מן האיברים הקוולנטיים המופיעים בפונקציית הגל).

כשלון ה - MO

אם ננסה בצורה נאיבית להשתמש בעקרונות שפיתחנו בכדי לתאר את מולקולת המתאן – CH4 נאמר כי אורביטל 2S של אטום הפחמן המרכזי הינו נמוך באנרגיה ועל כן אטומי המימן יעברו אינטראקציה עם אורביטלי ה – P של הפחמן. אולם באורביטלי ה – P מאוכלסים רק שני אלקטרונים ועל-כן נצפה למולקולה CH2ולא למולקולה CH4. קיבלנו, אם כן, כי התיאור הנאיבי של MO נשבר לעיתים.

1SH

2SC

2PC

כמוכן, כפי שכבר ראינו, השיטה אינה טובה לתיאור שבירת קשרים קוולנטיים – האיברים היוניים בפונקציית הגל נלקחים באותו המשקל כמו האיברים הקוולנטיים ועל כן מעוותים את שבירת הקשר. למרות זאת שיטת ה – LCAO-MO הינה הנפוצה ביותר לביצוע חישובים קוונטיים. נתאר כעת שיטה נוספת לתיאור הקשר הכימי.