

## Jak powstają orbitale molekularne?

- [Wprowadzenie](#)
- [Przeczytaj](#)
- [Animacja](#)
- [Sprawdź się](#)
- [Dla nauczyciela](#)



## Jak powstają orbitale molekularne?

Aby opisać stan elektronów w cząsteczce, należy wykorzystać funkcje falowe, zwane orbitalami molekularnymi (cząsteczkowymi).

Źródło: dostępny w internecie: [www.pixabay.com](http://www.pixabay.com), domena publiczna.

Dla niemal każdej istniejącej kowalencyjnej cząsteczki można narysować wzór Lewisa, przewidzieć geometrię molekularną oraz określić kąty pomiędzy wiązaniami. Jednak jedna z najważniejszych znanych nam cząsteczek, cząsteczka tlenu  $O_2$ , stanowi problem. Eksperymenty pokazują, że cząsteczka  $O_2$  ma dwa niesparowane elektrony, co we wzorach Lewisa nie zostało uwzględnione. Jak poradzić sobie z tą rozbieżnością? Niezależnie od sytuacji, pomocna może być znajomość pojęcia orbitalu molekularnego. Czy wiesz czym są orbitale molekularne i jak powstają?

### Twoje cele

- Zdefiniujesz pojęcie orbitalu molekularnego.
- Przeanalizujesz sposób powstawania orbitali molekularnych.
- Określisz rodzaje wiązań (wiązania  $\sigma$ , wiązania  $\pi$ ) w cząsteczkach związków nieorganicznych i organicznych.
- Sporządzisz diagram energetyczny cząsteczki dwuatomowej i na jego podstawie ocenisz jej stabilność energetyczną.

# Przeczytaj

---

Opis zachowania elektronów w cząsteczkach wymaga uwzględnienia faktu, że elektrony znajdują się w polu działania więcej niż jednego jądra atomowego. Aby opisać stan elektronów w cząsteczce, należy posłużyć się pojęciem orbitalu molekularnego. Tworzenie orbitali cząsteczkowych, zgodnie z **teorią orbitali molekularnych**, polega na przedstawianiu ich w postaci liniowej kombinacji [orbitali](#) atomowych.

## Ważne!

Orbitale atomowe poddane liniowej kombinacji muszą:

- mieć porównywalną energię;
- wykazywać jednakową symetrię w stosunku do osi łączącej jądra atomów;
- przenikać się w wystarczającym stopniu.

## Podział orbitali molekularnych

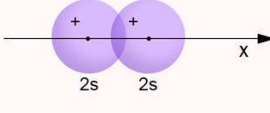
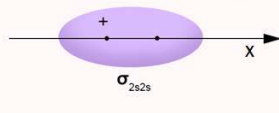
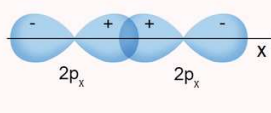
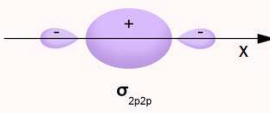
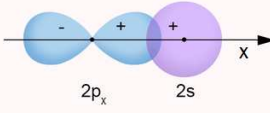
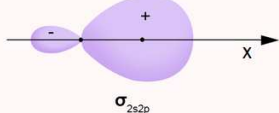
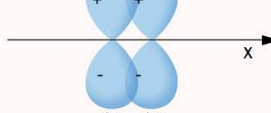
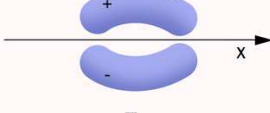
Orbital cząsteczkowe (molekularne, MO) dzielą się głównie na zlokalizowane i zdelokalizowane. Dodatkowo, można wyróżnić dwa inne podziały.

### Podział orbitali cząsteczkowych

ze względu na symetrię	ze względu na energię
<ul style="list-style-type: none"><li>• <a href="#">orbitale typu <math>\sigma</math></a></li><li>• <a href="#">orbitale typu <math>\pi</math></a></li></ul>	<ul style="list-style-type: none"><li>• <a href="#">orbitale wiążące</a></li><li>• <a href="#">orbitale antywiążące</a></li><li>• <a href="#">orbitale niewiążące</a></li></ul>

# Sposoby tworzenia orbitali molekularnych typu $\pi$ i $\sigma$ (wiązących)

Orbital molekularny  $\sigma$  i orbital molekularny  $\pi$  to podstawowe typy orbitali molekularnych. **Orbital**  $\sigma$  powstaje jako wynik liniowej kombinacji orbitali atomowych, takich jak  $s$  i  $s$ ,  $s$  i  $p_x$  oraz  $p_x$  i  $p_x$ , a **orbital**  $\pi$  powstaje z orbitali  $p_z$  i  $p_z$ ,  $p_y$  i  $p_y$ . W rozważaniach przyjęto, że osią łączącą jądra atomów jest oś  $x$ . Kierunkowość oraz symetria orbitali molekularnych są konsekwencją kierunkowości i symetrii orbitali atomowych.

Nakładanie dwóch orbitali typu s		Nakładanie dwóch orbitali typu $p_x$	
	powstaje orbital molekularny typu $\sigma$ 		powstaje orbital molekularny typu $\sigma$ 
Nakładanie dwóch orbitali: typu s i typu $p_x$		Nakładanie dwóch orbitali typu $p_z$ (lub dwóch orbitali typu $p_y$ )	
	powstaje orbital molekularny typu $\sigma$ 		powstaje orbital molekularny typu $\pi$ 

Sposoby tworzenia orbitali molekularnych typu  $\pi$  i  $\sigma$  (wiązących). Znaki „+” i „-” na rysunkach określają znak funkcji falowej.

Źródło: GroMar Sp. z o.o. na podstawie: M. Krzeczowska, J. Loch, A. Mizera, *Repetitorium chemia : Liceum - poziom podstawowy i rozszerzony*, Wydawnictwo Szkolne PWN, Warszawa - Bielsko-Biała 2010., licencja: CC BY-SA 3.0.

Dwa orbitale atomowe różnych atomów tworzą zawsze dwa orbitale cząsteczkowe danego typu ( $\sigma$  lub  $\pi$ ): [wiązący](#) i [antywiązący](#), które różnią się energią. **Orbital wiążący** to wynik sumowania orbitali atomowych, ma on niższą energię niż **orbital antywiązący** (oznaczany gwiazdką), będący wynikiem ich odejmowania. Orbital antywiązący ma wyższą energię w stosunku do energii wyjściowych orbitali atomowych. Obsadzanie orbitalu wiążącego elektronami jest dla układu energetycznie

korzystne. Istnieją również niewiążące orbitale molekularne, których energia jest w przybliżeniu równa (lub równa) energii wyjściowych orbitali atomowych.

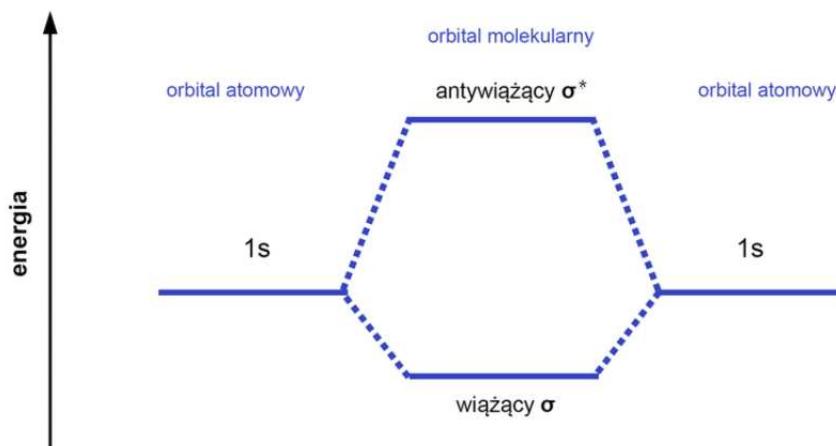
## Diagram poziomów orbitalnych

Kolejność zapełniania orbitali molekularnych można uszeregować według wzrastającej energii:

$$\sigma_s < \sigma_s^* < \pi_{p_y} = \pi_{p_z} < \sigma_{p_x} < \pi_{p_y}^* = \pi_{p_z}^* < \sigma_{p_x}^*$$

### Ważne!

Pamiętaj! Rysując diagram tworzenia orbitali cząsteczkowych, wystarczy brać pod uwagę walencyjne orbitale atomowe.



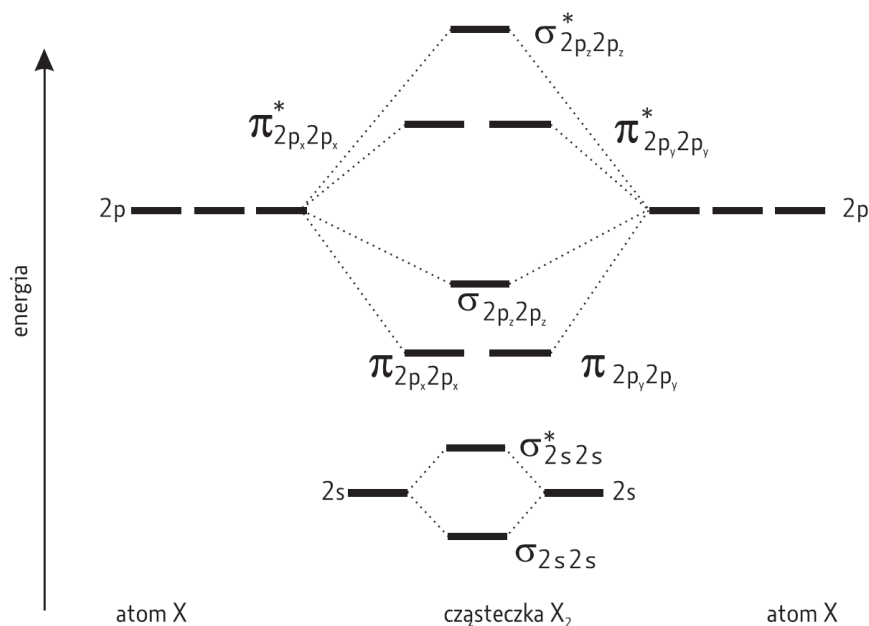
Ogólny schemat diagramu energetycznego orbitali molekularnych. Wiązanie utworzone z orbitali 1s może mieć miejsce tylko w przypadku wodoru i helu.

Źródło: [https://epodreczniki.open.agh.edu.pl/openagh-podreczniki\\_view.php?mode=view&catId=82&handbookId=74&moduleId=768](https://epodreczniki.open.agh.edu.pl/openagh-podreczniki_view.php?mode=view&catId=82&handbookId=74&moduleId=768), licencja: CC BY-SA 3.0.

# Cząsteczki homoatomowe

## 1. Liczba atomowa $Z \leq 7$

Poniżej przedstawiono schemat diagramu energetycznego dla cząsteczki typu  $X_2$ . Założono, że  $X$  to atom pierwiastka o liczbie atomowej  $Z \leq 7$ , oraz że oś łącząca jądra atomów, czyli oś wiązania, to oś  $z$ .



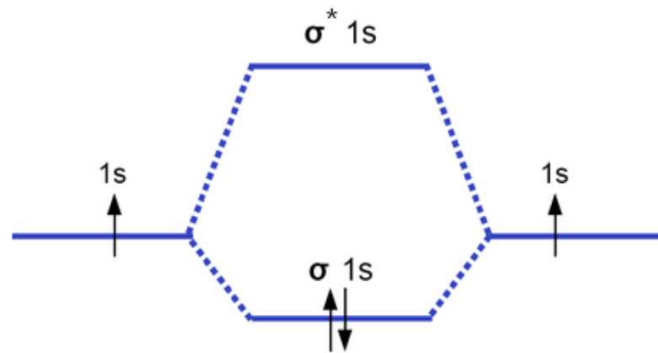
Schemat diagramu energetycznego dla cząsteczki  $X_2$  o liczbie atomowej  $Z \leq 7$ .

Źródło: GroMar Sp. z o.o., licencja: CC BY-SA 3.0.

### Przykład 1

### Diagram poziomów energetycznych orbitali w cząsteczce $H_2$

poziomy energetyczne orbitali w cząsteczce  $H_2$

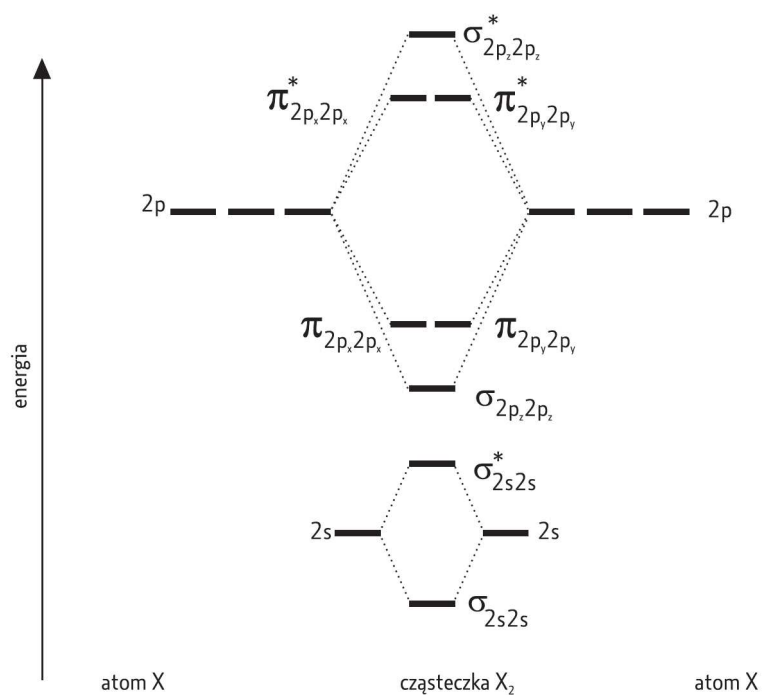


Poziomy energetyczne orbitali w cząsteczce homoatomowej (cząsteczka wodoru).

Źródło: [https://epodreczniki.open.agh.edu.pl/openagh-podreczniki\\_view.php?mode=view&catelId=82&handbookId=74&moduleId=768](https://epodreczniki.open.agh.edu.pl/openagh-podreczniki_view.php?mode=view&catelId=82&handbookId=74&moduleId=768), licencja: CC BY-SA 3.0.

## 2. Liczba atomowa $Z > 7$

Poniżej przedstawiono schemat diagramu energetycznego dla cząsteczki typu  $X_2$ . Założono, że X to atom pierwiastka o liczbie atomowej  $Z > 7$ , oraz że oś łącząca jądra atomów, czyli oś wiązania, to oś  $z$ .





## Rząd wiązania

Na podstawie diagramu energetycznego cząsteczki można określić tzw. **rząd wiązania**. Z definicji jest to połowa różnicy między liczbą elektronów obsadzających orbitale wiążące a liczbą elektronów obsadzających orbitale antywiązące, co można zapisać w postaci wzoru:

$$R = \frac{n_e - n_e^*}{2}$$

gdzie:

- $R$  – rząd wiązania;
- $n_e$  – liczba elektronów na orbitalu wiążącym;
- $n_e^*$  – liczba elektronów na orbitalu antywiązącym.

Rząd wiązania, przyjmujący wartości całkowite, określa krotność wiązania. Im wyższy rząd wiązania, tym większa trwałość wiązania. Jeżeli rząd wiązania wynosi zero, oznacza to, że cząsteczka nie istnieje (brak stabilności energetycznej).

### Przykład 3

Poniżej przedstawiono budowę cząsteczki tlenku węgla(II) uwzględniając teorię orbitali molekularnych. Jak wynika z poniższego diagramu energetycznego orbitali, na orbitalu wiążącym znajduje się 8 elektronów, a na orbitalu antywiązącym znajdują się 2 elektrony. Stąd rząd wiązania wynosi:

$$R = \frac{8 - 2}{2} = 3$$

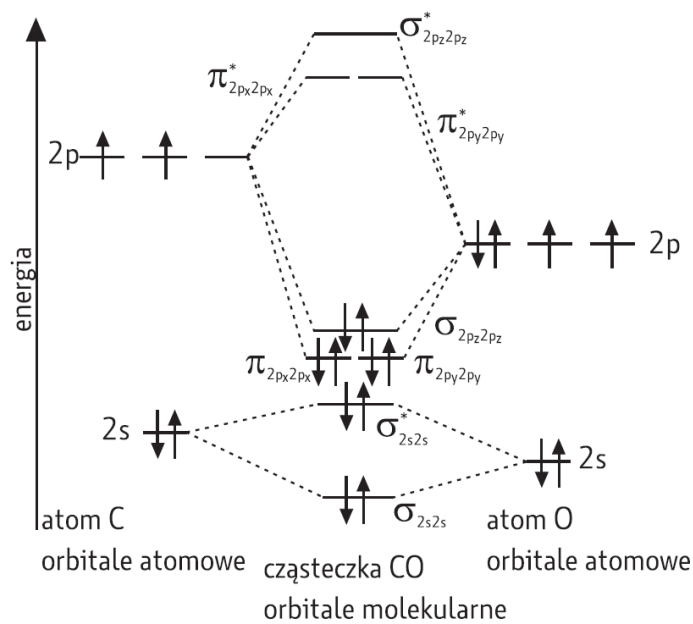


Diagram energetyczny orbitali dla cząsteczki tlenku węgla(II).

Źródło: GroMar Sp. z o.o., licencja: CC BY-SA 3.0.

## Słownik

### orbital

(łac. *orbita* „koleina”, „droga”) funkcja falowa, opisująca stan jednego lub dwóch elektronów, zależna od współrzędnych w układzie kartezjańskim lub sferycznym, określająca gęstość prawdopodobieństwa napotkania elektronu w danym punkcie przestrzeni, która jest proporcjonalna do kwadratu funkcji falowej

### orbital wiązący

orbital molekularny, którego energia jest mniejsza od energii każdego z orbitali atomowych oraz orbitalu antywiążącego; powstaje w wyniku sumowania orbitali atomowych

### orbital antywiązący

orbital molekularny (oznaczany gwiazdką), którego energia jest wyższa w stosunku do energii wyjściowych orbitali atomowych; powstaje jako wynik odejmowania orbitali atomowych

### **orbital typu $\sigma$**

orbital symetryczny (nie zmieniający kształtu ani znaku) względem odbicia w płaszczyźnie przechodzącej przez oś wiązania

### **orbital typu $\pi$**

orbital antysymetryczny (zmieniający znak) względem odbicia w płaszczyźnie przechodzącej przez oś wiązania

### **orbitale niewiążące (orbitale wolnych par elektronowych)**

mogą występować w cząsteczce wieloelektronowej; są to orbitale elektronów nie biorących udziału w tworzeniu wiązania, które w cząsteczce w znacznym stopniu zachowują postać, jaką miały w izolowanych atomach

## **Bibliografia**

Krzczkowska M., Loch J., Mizera A., *Chemia. Repetytorium. Liceum – poziom podstawowy i rozszerzony*, Warszawa – Bielsko-Biała 2010.

# Animacja

---

## Polecenie 1

Czy wiesz, w jaki sposób powstają orbitale molekularne? Zapoznaj się z poniższą animacją oraz rozwiąż ćwiczenia.

Trwa wczytywanie danych..

## Jak powstają orbitale molekularne?

Film dostępny pod adresem </preview/resource/R132xsOWCR1I2>

Animacja pt. „*Jak powstają orbitale molekularne?*”

Źródło: GroMar Sp. z o.o., licencja: CC BY-SA 3.0.


Animacja nawiązująca do treści materiału dotyczącej powstawania orbitali molekularnych.

---

Ćwiczenie 1

Ćwiczenie 2

# Sprawdź się

Pokaż ćwiczenia:   

## Ćwiczenie 1



Który z prezentowanych modeli prezentuje wiążący orbital molekularny typu  $\sigma_{p-p}$ .



A



B



C



D

Informacja do ćwiczenia

Źródło: GroMar Sp. z o.o., licencja: CC BY-SA 3.0.

## Ćwiczenie 2



Przyporządkuj nazwy orbitali w odpowiednie miejsca.

Podział orbitali ze względu na symetrię

orbitale typu  $\pi$

orbitale antywiążące

orbitale niewiążące

Podział orbitali ze względu na energię

orbitale wiążące

orbitale typu  $\sigma$

### Ćwiczenie 3



Określ, jakie warunki muszą spełniać orbitale atomowe poddane liniowej kombinacji.

**Odpowiedź:**

### Ćwiczenie 4



Zaznacz informacje związane z orbitalem wiążącym.

powstaje w wyniku sumowania orbitali atomowych

oznaczany jest symbolem gwiazdki

powstaje w wyniku odejmowania orbitali atomowych

jego energia jest mniejsza od energii każdego z orbitali atomowych ale wyższa od energii orbitalu antywiążącego

jego energia jest mniejsza od energii każdego z orbitali atomowych oraz orbitalu antywiążącego

## Ćwiczenie 5



Przedstaw graficznie sposób tworzenia wiązań w cząsteczce etynu. Na wykonanym rysunku zaznacz wiązania typu  $\pi$  i  $\sigma$ . Następnie uzupełnij poniższy tekst.

Rysunek:

Odpowiedź zapisz w zeszycie do lekcji chemii, zrób zdjęcie, a następnie umieść je w wyznaczonym polu.

Zaloguj się, aby dodać ilustrację.

Uzupełnij zdania.

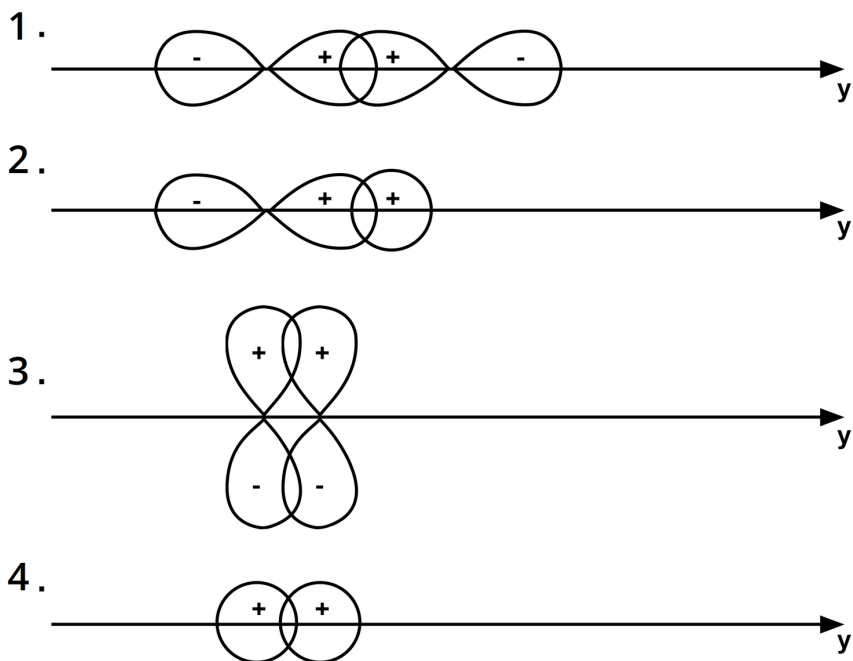
W cząsteczce etynu występuje [ ] wiązanie potrójne, które tworzą: [ ] orbital molekularny typu [ ] i [ ] orbitale molekularne typu  $\pi$ . Orbital molekularny typu [ ] w wiązaniu potrójnym powstał w wyniku kombinacji liniowej [ ] orbitali zhybrydizowanych typu [ ], a niezhybrydizowane dwa orbitale typu  $p$  tworzą dwa wiązania typu [ ]. Łącznie w cząsteczce występują [ ] orbitale molekularne typu  $\sigma$ .

$\sigma$   $sp$  dwóch jedno trzy  $sp^3$  cztery dwa jeden  $\pi$   $\sigma$   $\pi$   $sp$   
120  $sp^2$   $\sigma$  trzy

## Ćwiczenie 6



Napisz, jaki typ orbitalu molekularnego ( $\pi$  czy  $\sigma$ ) utworzy się w każdej przedstawionej niżej schematycznym rysunkiem sytuacji.



Informacja do ćwiczenia

Źródło: GroMar Sp. z o.o., licencja: CC BY-SA 3.0.

Odpowiedź zapisz w zeszyte do lekcji chemii, zrób zdjęcie, a następnie umieść je w wyznaczonym polu.

Zaloguj się, aby dodać ilustrację.

## Ćwiczenie 7



Zastanów się i odpowiedz na pytanie, czy cząsteczka berylu  $\text{Be}_2$  jest stabilna energetycznie. W tym celu:

- A. Napisz skróconą konfigurację elektronową atomu berylu.
- B. Narysuj diagram energetyczny hipotetycznej cząsteczki  $\text{Be}_2$ .
- C. Ustal rząd wiązania w tej cząsteczce.

Odpowiedź zapisz w zeszycie do lekcji chemii, zrób zdjęcie, a następnie umieść je w wyznaczonym polu.

Zaloguj się, aby dodać ilustrację.

## Ćwiczenie 8



Narysuj diagram energetyczny orbitali cząsteczki  $\text{HCl}$ .

Odpowiedź zapisz w zeszycie do lekcji chemii, zrób zdjęcie, a następnie umieść je w wyznaczonym polu.

Zaloguj się, aby dodać ilustrację.

# Dla nauczyciela

---

**Autor:** Gabriela Iwińska

**Przedmiot:** Chemia

**Temat:** Jak powstają orbitale molekularne?

**Grupa docelowa:**

Liceum ogólnokształcące i technikum, liceum ogólnokształcące, technikum, zakres rozszerzony

**Podstawa programowa:**

Poziom podstawowy

III. Wiązania chemiczne. Oddziaływania międzycząsteczkowe. Uczeń:

5. określa typ wiązania ( $\sigma$  i  $\pi$ ) w cząsteczkach związków nieorganicznych i organicznych.

III. Wiązania chemiczne. Oddziaływania międzycząsteczkowe. Uczeń:

5. określa typ wiązania ( $\sigma$  i  $\pi$ ) w cząsteczkach związków nieorganicznych i organicznych; opisuje powstawanie orbitali molekularnych.

**Kształtowane kompetencje kluczowe:**

- kompetencje cyfrowe;
- kompetencje osobiste, społeczne i w zakresie umiejętności uczenia się;
- kompetencje matematyczne oraz kompetencje w zakresie nauk przyrodniczych, technologii i inżynierii;
- kompetencje w zakresie rozumienia i tworzenia informacji.

**Cele operacyjne (językiem ucznia):**

- zdefiniuje pojęcie orbitalu molekularnego;
- przeanalizuje sposób powstawania orbitali molekularnych;
- określa rodzaje wiązań (wiązania  $\sigma$ , wiązania  $\pi$ ) w cząsteczkach związków nieorganicznych i organicznych;
- sporządza diagram energetyczny cząsteczki dwuatomowej i na jego podstawie ocenia jej stabilność energetyczną.

**Strategie nauczania:**

- strategia asocjacyjna;

- strategia problemowa.

### **Metody i techniki nauczania:**

- analiza materiału źródłowego oraz ćwiczenia uczniowskie;
- dyskusja;
- technika zdań podsumowujących.

### **Formy pracy:**

- praca indywidualna;
- praca w parach;
- praca w grupach;
- praca całego zespołu klasowego.

### **Środki dydaktyczne:**

- komputery z głośnikami, słuchawkami i dostępem do internetu;
- zasoby multimedialne zawarte w e-materiale;
- tablica interaktywna/tablica, pisak/kreda.

### **Przebieg lekcji**

#### **Faza wstępna:**

1. Prowadzący prosi uczniów, aby zgłaszali swoje propozycje pytań do tematu. Jedna osoba może zapisywać je na tablicy. Gdy uczniowie wyczerpią pomysły, a pozostały jakieś ważne kwestie do poruszenia, nauczyciel je dopowiada.
2. Nauczyciel przedstawia uczniom cel zajęć oraz wspólnie ustala z nimi kryteria sukcesu do tematu: „Jak powstają orbitale molekularne?”.

#### **Faza realizacyjna:**

1. Uczniowie zwracają uwagę na: podział orbitali, sposoby tworzenia orbitali, diagram poziomów energetycznych orbitali.
2. Uczniowie dobierają się w grupy. Nauczyciel podaje pytanie problemowe do rozwiązania: Jak powstają wiązania typu pi w cząsteczce etenu? Po wyznaczonym czasie, chętne osoby prezentują efekty pracy grupowej. Pozostali uczniowie i nauczyciel weryfikują poprawność merytoryczną wypowiedzi.

#### **Faza podsumowująca:**

1. W ramach podsumowania uczniowie wykonują ćwiczenie numer 1. Ewentualne problemy prowadzący omawia wraz z uczniami na forum klasy.
2. Jako podsumowanie lekcji nauczyciel może wykorzystać zdania do uzupełnienia, które uczniowie również zamieszczają w swoim portfolio:

- Przypomniałem/łam sobie, że...
- Co było dla mnie łatwe...
- Czego się nauczyłem/łam...
- Co sprawiało mi trudność...

### **Praca domowa:**

1. Nauczyciel prosi uczniów o wykonanie ćwiczeń zawartych w e-materiale – zestaw ćwiczeń, które nie zostały rozwiązane podczas zajęć.
2. Uczniowie opracowują FAQ (minimum trzy pytania i odpowiedzi) do tematu lekcji („Jak powstają orbitale molekularne?”).

### **Materiały pomocnicze:**

- K. H. Lautenschläger, W. Schröter, A. Wanninger, *Nowoczesne kompendium chemii*, tłum. A. Dworak, Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa 2014.
- L. Jones, P. Atkins, *Chemia ogólna : cząsteczki, materia, reakcje*, tłum. J. Kuryłowicz, Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa 2004.

### **Wskazówki metodyczne opisujące różne zastosowania multimedium:**

- Medium „Animacja” może być wykorzystane jako pomoc podczas przygotowywania się do lekcji o temacie: „Jak powstają orbitale molekularne?” oraz do sprawdzianu.