

## TEORIA ORBITALI MOLECOLARI (MO)

PARAMAGNETISMO

elettroni spaiati

Si comporta come un magnete nel campo magnetico esterno

DIAMAGNETISMO

elettroni tutti accoppiati quindi il campo magnetico di un  $e^-$  si annulla con quello dell'altro  $e^-$  a spin opposti

Teoria si basa  $\rightarrow$  gli **ELETTRONI** possono essere rappresentati da certe **FUNZIONI D'ONDA  $\psi$**

determinano energia e forma  $\leftarrow$  dette **ORBITALI MOLECOLARI**

$\psi^2 \rightarrow$  probabilità di trovare l'elettrone in un determinato punto nello spazio

**IL VALORE DELL'ENERGIA**  $\rightarrow$  energia necessaria per orbitare della molecola e l'elettrone che occupa l'orbitale

metodo per ottenere l'orbitale

**LCAO** (Linear combination of Atomic orbitals)

$\psi^+ \psi^-$  (della combinazione di due orbitali atomici)

$\rightarrow$  si ottengono due orbitali molecolari

La probabilità di trovare l'elettrone in un certo punto dipende dal valore del quadrato della funzione d'onda

se  $e^-$  occupa  **$\psi^+$**  si forma un legame stabile tra i due nuclei

**orbitale di legame**

**$\psi^-$   $\rightarrow$  orbitale di anti legame**

Nel grafico presente  
il primo nodo nel quale la probabilità di trovare l'elettrone è zero

$\rightarrow$  poiché la presenza di un elettrone in questo orbitale favorisce la dissociazione della molecola

energia orbitale  **$\psi^+$**   $\rightarrow$  minore di quella degli atomi isolati

mostra minimo in corrispondenza ad una distanza pari alla distanza di legame

**$\psi^-$**   $\rightarrow$  maggiore energia di quella degli atomi isolati

Combinazione lineare  $\rightarrow$  si ottiene orbitali molecolari di energie rispettivamente maggiore e minore

affinche' si formino:

- $\psi_A$  e  $\psi_B \rightarrow$  dei rispettivi atomi  $\rightarrow$  Valori confrontabili
- $\psi_A$  e  $\psi_B \rightarrow$  le loro nuove cariche si sommano quanto più possibile
- $\psi_A$  e  $\psi_B \rightarrow$  stessa simmetria

ES.

un orbitale s per ragioni di simmetria si combina solo con un orbitale s o un orbitale  $p_x$  e NON  $p_y$  e  $p_z$ .  
 $p_y$  e  $p_z$  si possono combinare solo con orbitali dello stesso tipo

Combinazioni

$s$  o  $p_x \rightarrow$  sono detti di **TIPO  $\sigma$**  densità distribuita in modo simmetrico  
 intorno all'asse internucleare

combinazioni

$p_y$  e  $p_z \rightarrow$  sono detti di **TIPO  $\pi$**  la loro densità elettronica concentrata sopra e sotto l'asse internucleare.

antilegame  $\rightarrow \sigma^* \pi^*$

orbitale molecolare  $\rightarrow$  occupato al massimo da due elettroni con spin opposto.

affinche' il legame sia stabile

occorre più elettroni negli orbitali di legame che in quelli di antilegame

**ORDINE DI LEGAME**

$$OL = \frac{\text{numero } e^- \text{ di legame} - \text{numero di } e^- \text{ di antilegame}}{2}$$

può assumere valori interi, frazionari o nulli  
 quanto più alto è l'ordine di legame, tanto maggiore è l'energia di legame e tanto minore la distanza fra i due atomi

ORDINE DI LEGAME 0  $\rightarrow$  la molecola non può esistere.