



**Metodo LCAO (esempio di trattazione per la molecola monoelettronica  $H_2^+$ )**

$$\Psi = N(c_A \Psi_A + c_B \Psi_B)$$

**N tale che:  $\int \Psi^2 dV = 1$**

**$c_A, c_B$  tali che:**

$$\mathbf{dE/dc_A = 0}$$

$$\mathbf{dE/dc_B = 0}$$

**cioè:**

$$\mathbf{c_A = c_B}$$

$$\mathbf{c_A = -c_B}$$



**Metodo LCAO (esempio di trattazione per la molecola monoelettronica  $H_2^+$ )**

$$\Psi = N(c_A \Psi_A + c_B \Psi_B)$$

$$\Psi_+ = N c_A (\Psi_A + \Psi_B)$$

$$\Psi_- = N c_A (\Psi_A - \Psi_B)$$

**N** tale che:  $\int \Psi^2 dV = 1$

**$c_A, c_B$**  tali che:

$$dE/dc_A = 0$$

$$dE/dc_B = 0$$

**cioè:**

$$c_A = c_B$$

$$c_A = -c_B$$



**Metodo LCAO (esempio di trattazione per la molecola monoelettronica  $H_2^+$ )**

$$\Psi = N(c_A \Psi_A + c_B \Psi_B)$$

$$\Psi_+ = N c_A (\Psi_A + \Psi_B)$$

$$\Psi_- = N c_A (\Psi_A - \Psi_B)$$

$$\Psi_+^2 = N^2 c_A^2 (\Psi_A + \Psi_B)^2$$

$$\Psi_-^2 = N^2 c_A^2 (\Psi_A - \Psi_B)^2$$

**N** tale che:  $\int \Psi^2 dV = 1$

**$c_A, c_B$**  tali che:

$$dE/dc_A = 0$$

$$dE/dc_B = 0$$

**cioè:**

$$c_A = c_B$$

$$c_A = -c_B$$



Metodo LCAO (esempio di trattazione per la molecola monoelettronica  $H_2^+$ )

$$\Psi = N(c_A \Psi_A + c_B \Psi_B)$$

$$\Psi_+ = N c_A (\Psi_A + \Psi_B)$$

$$\Psi_- = N c_A (\Psi_A - \Psi_B)$$

$$\Psi_+^2 = N^2 c_A^2 (\Psi_A + \Psi_B)^2$$

$$\Psi_-^2 = N^2 c_A^2 (\Psi_A - \Psi_B)^2$$

N tale che:  $\int \Psi^2 dV = 1$

$c_A, c_B$  tali che:

$$dE/dc_A = 0$$

$$dE/dc_B = 0$$

cioè:

$$c_A = c_B$$

$$c_A = -c_B$$

$$\Psi_+^2 = N^2 c_A^2 (\Psi_A^2 + 2 \Psi_A \Psi_B + \Psi_B^2)$$

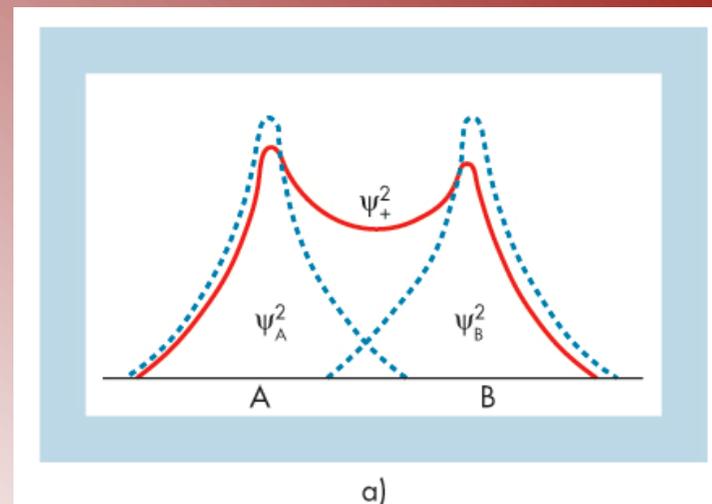
$$\Psi_-^2 = N^2 c_A^2 (\Psi_A^2 - 2 \Psi_A \Psi_B + \Psi_B^2)$$



SAPIENZA  
UNIVERSITÀ DI ROMA

Andamento della densità elettronica lungo l'asse internucleare della molecola  $H_2^+$  :

a) orbitale molecolare legante  $\Psi_+$ .

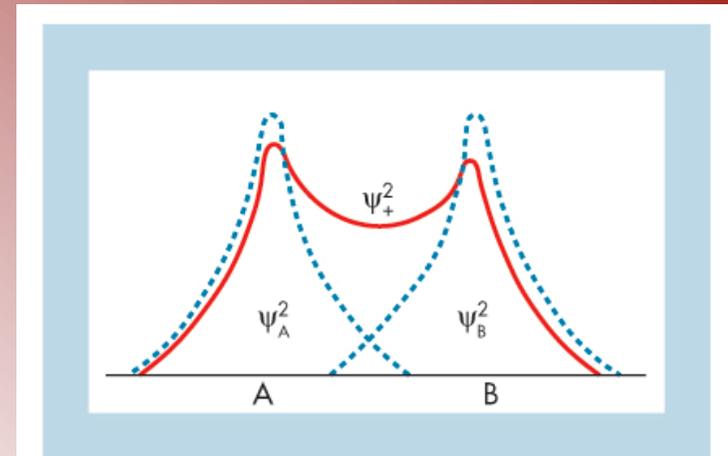




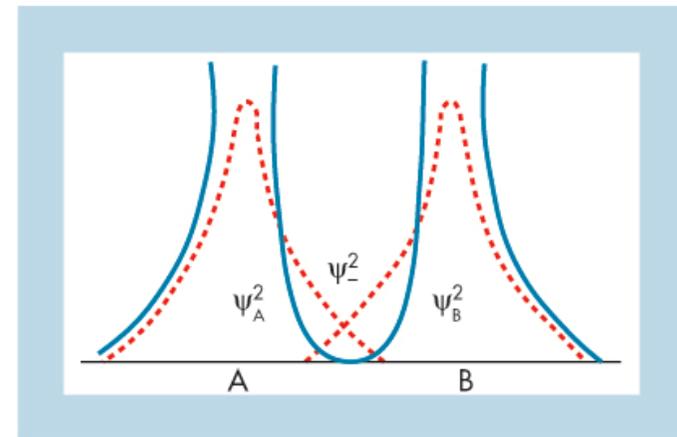
SAPIENZA  
UNIVERSITÀ DI ROMA

Andamento della densità elettronica lungo l'asse internucleare della molecola  $H_2^+$  :

- a) orbitale molecolare legante  $\Psi_+$ .
- b) orbitale molecolare antilegante  $\Psi_-$ .



a)



b)



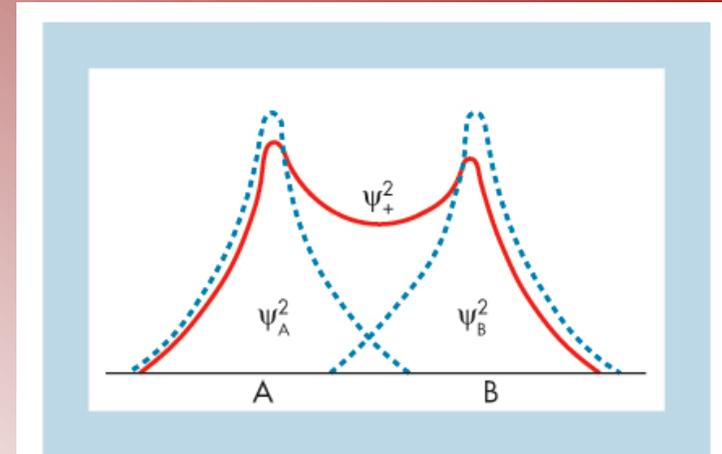
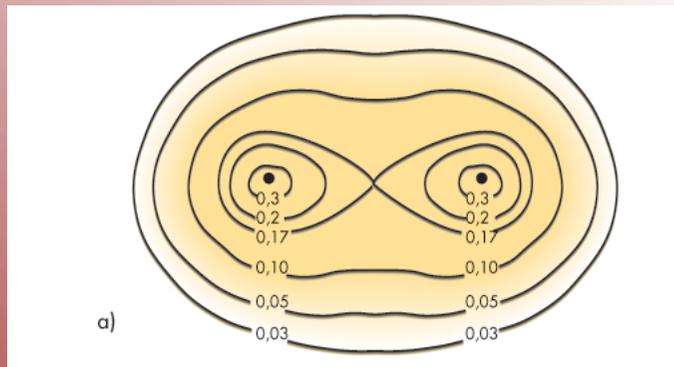
SAPIENZA  
UNIVERSITÀ DI ROMA

Andamento della densità elettronica lungo l'asse internucleare della molecola  $H_2^+$  :

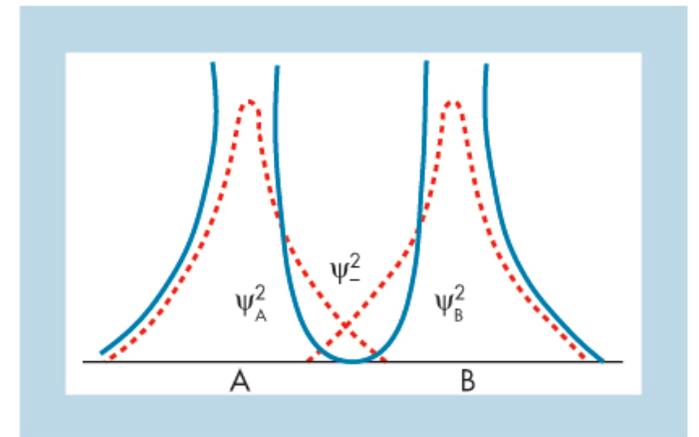
- a) orbitale molecolare legante  $\Psi_+$ .
- b) orbitale molecolare antilegante  $\Psi_-$ .

Superfici di isodensità elettroniche:

- a) orbitale molecolare legante  $\Psi_+$ ;



a)



b)



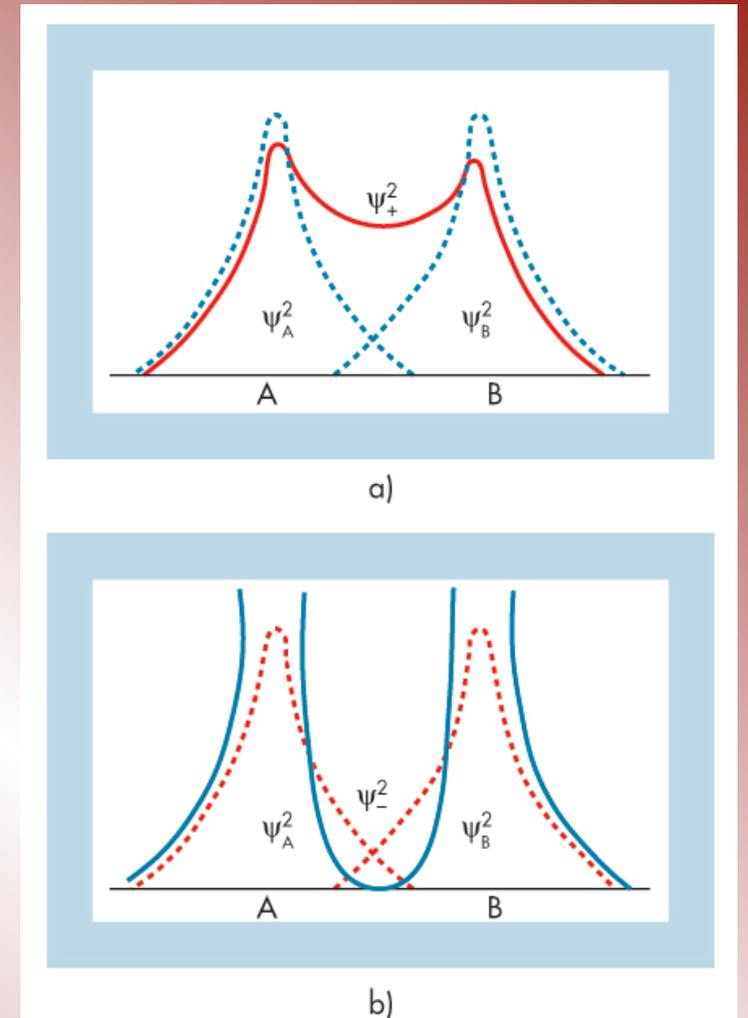
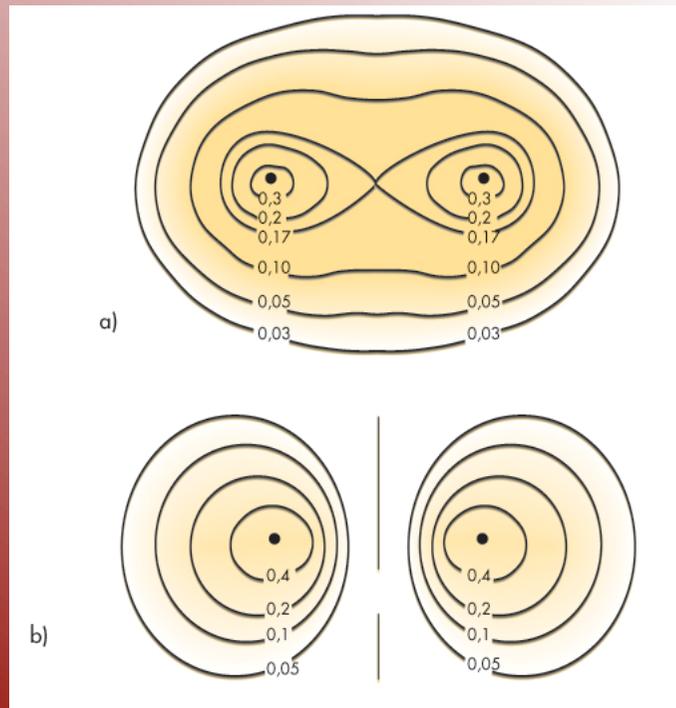
SAPIENZA  
UNIVERSITÀ DI ROMA

Andamento della densità elettronica lungo l'asse internucleare della molecola  $H_2^+$  :

- a) orbitale molecolare legante  $\Psi_+$ .
- b) orbitale molecolare antilegante  $\Psi_-$ .

Superfici di isodensità elettroniche:

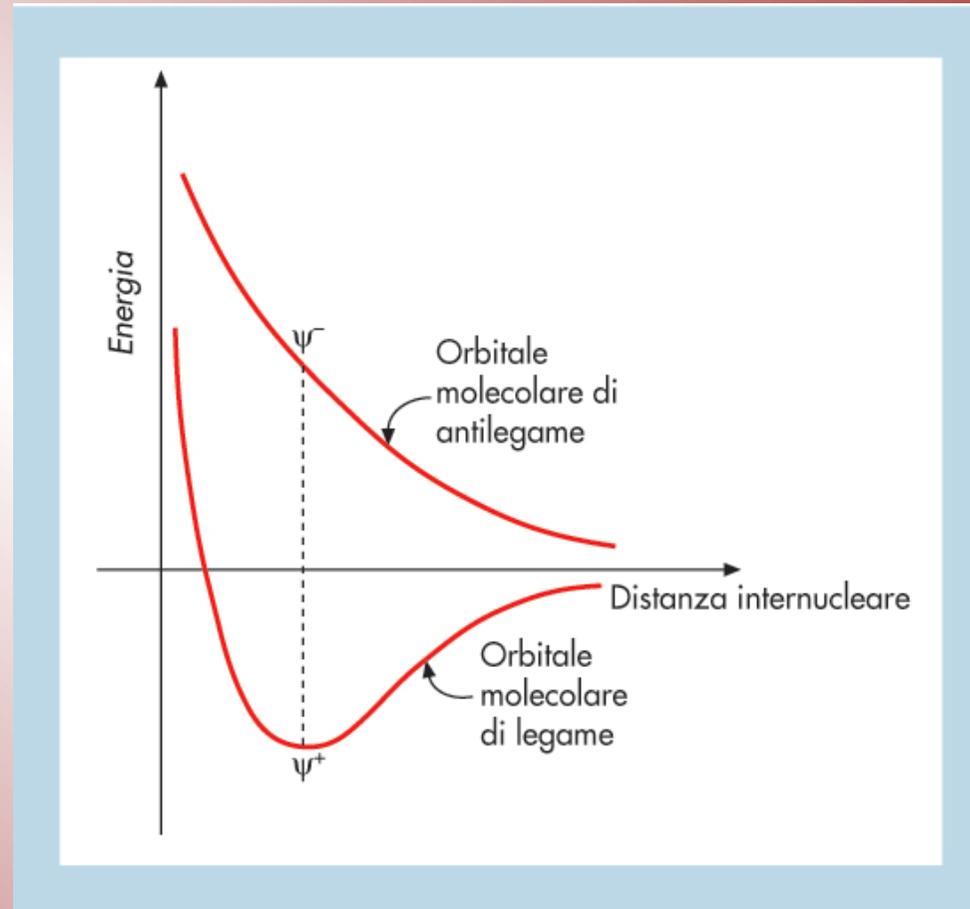
- a) orbitale molecolare legante  $\Psi_+$ ;
- b) orbitale molecolare antilegante  $\Psi_-$ .





SAPIENZA  
UNIVERSITÀ DI ROMA

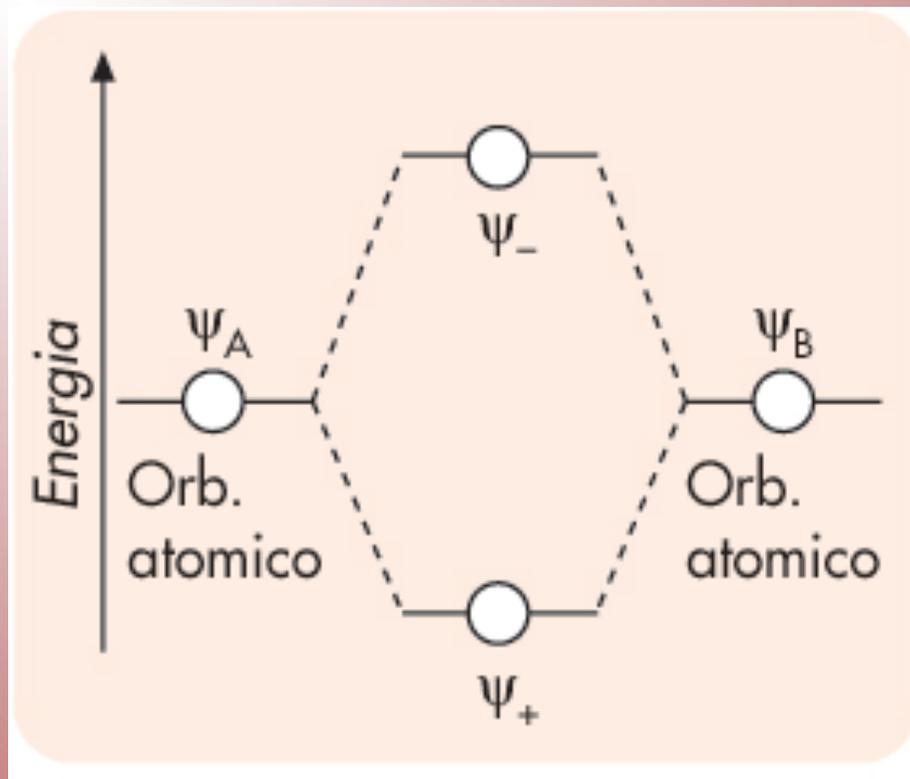
## Energie degli orbitali molecolari in $H_2^+$





**SAPIENZA**  
UNIVERSITÀ DI ROMA

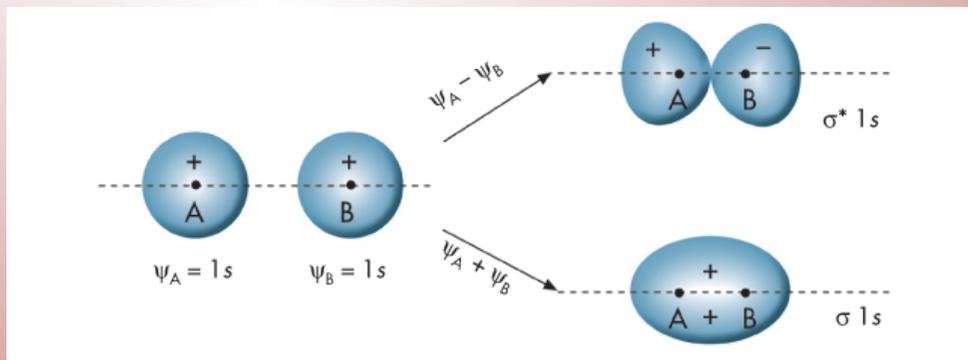
## Formazione di alcuni orbitali molecolari dagli orbitali atomici





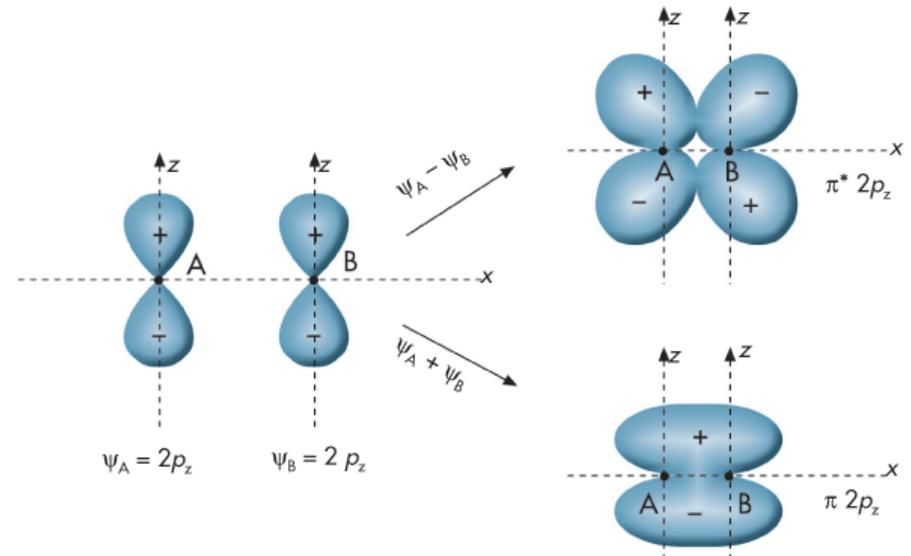
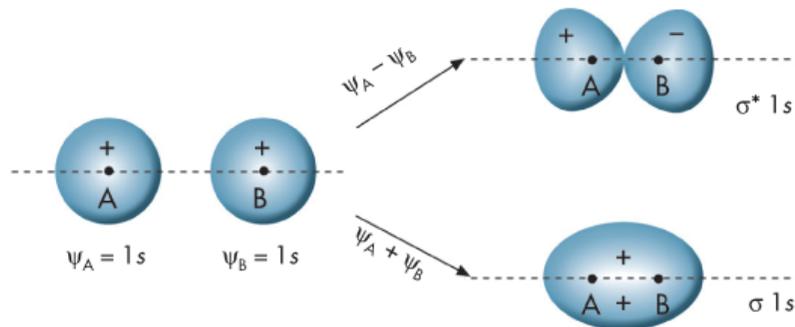
SAPIENZA  
UNIVERSITÀ DI ROMA

## Rappresentazione schematica della formazione di alcuni orbitali molecolari



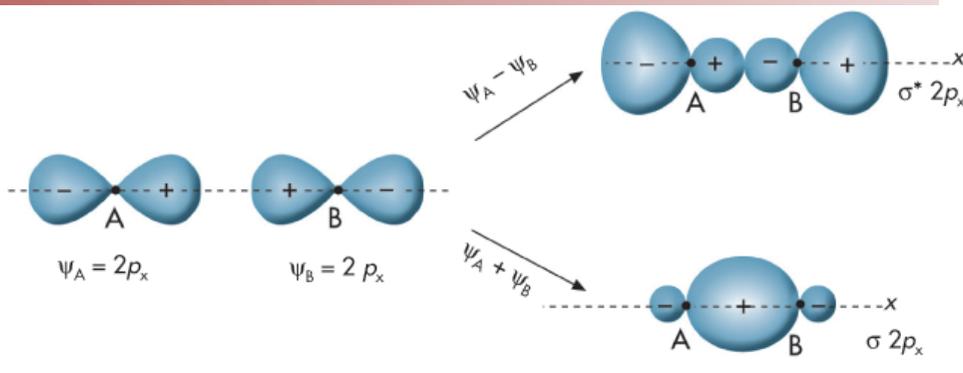
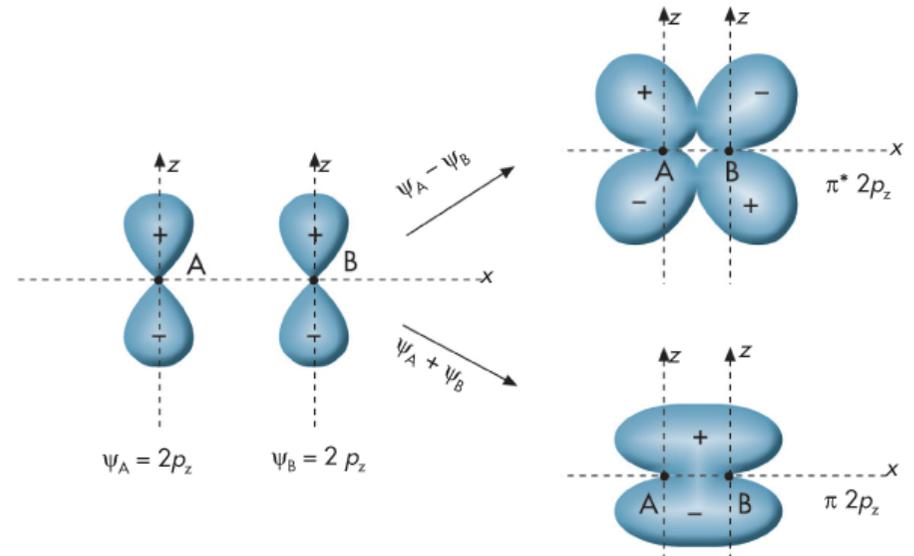
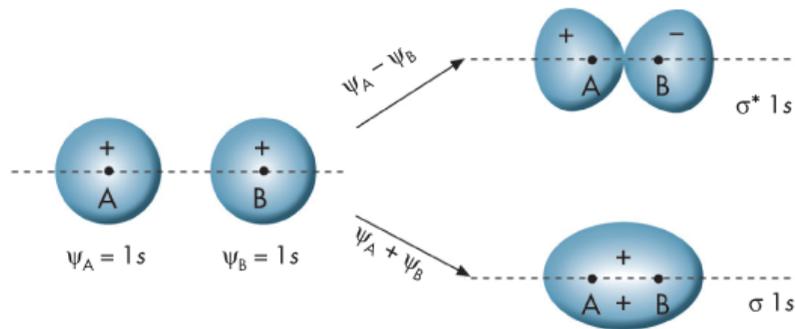


## Rappresentazione schematica della formazione di alcuni orbitali molecolari



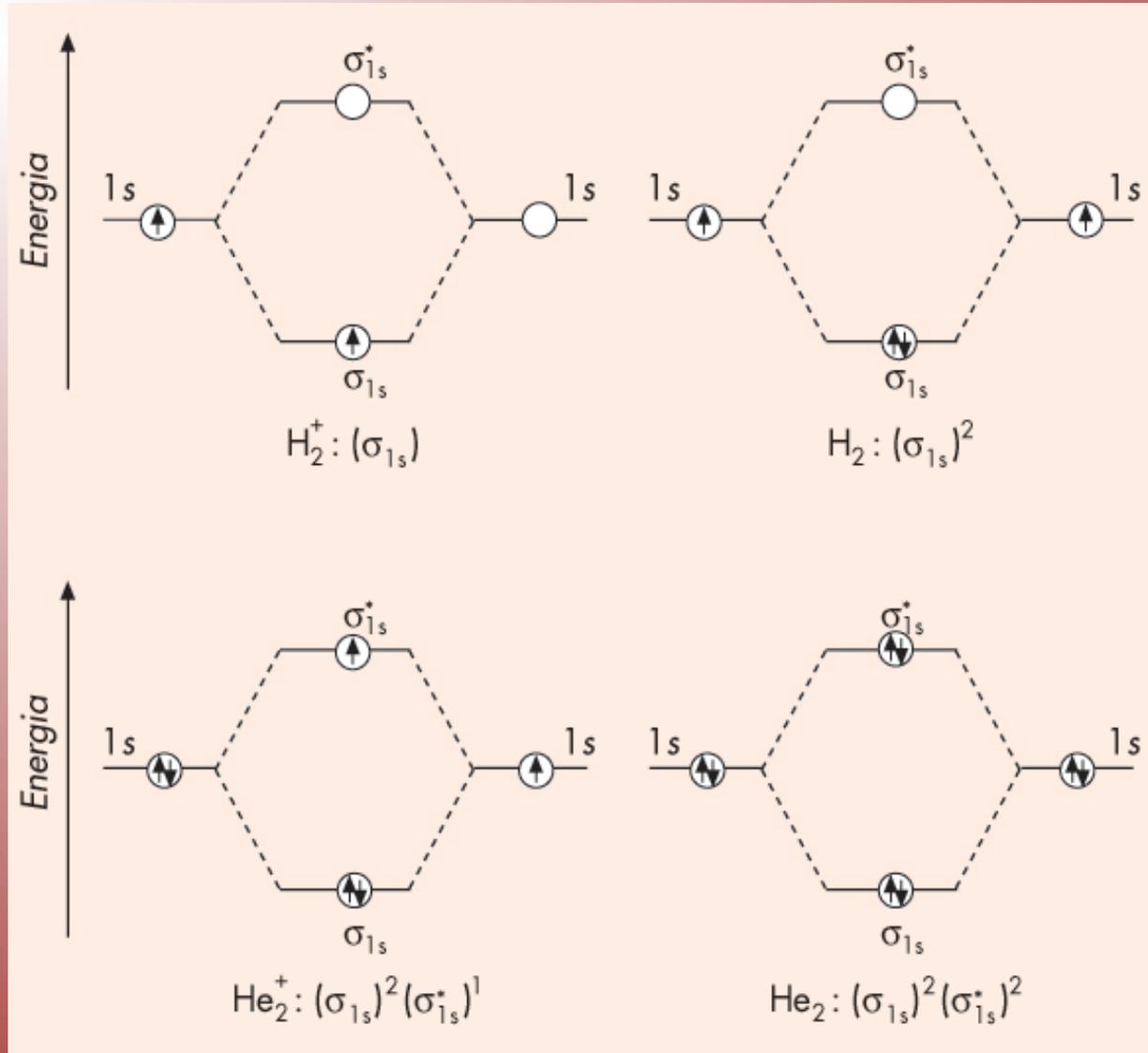


## Rappresentazione schematica della formazione di alcuni orbitali molecolari





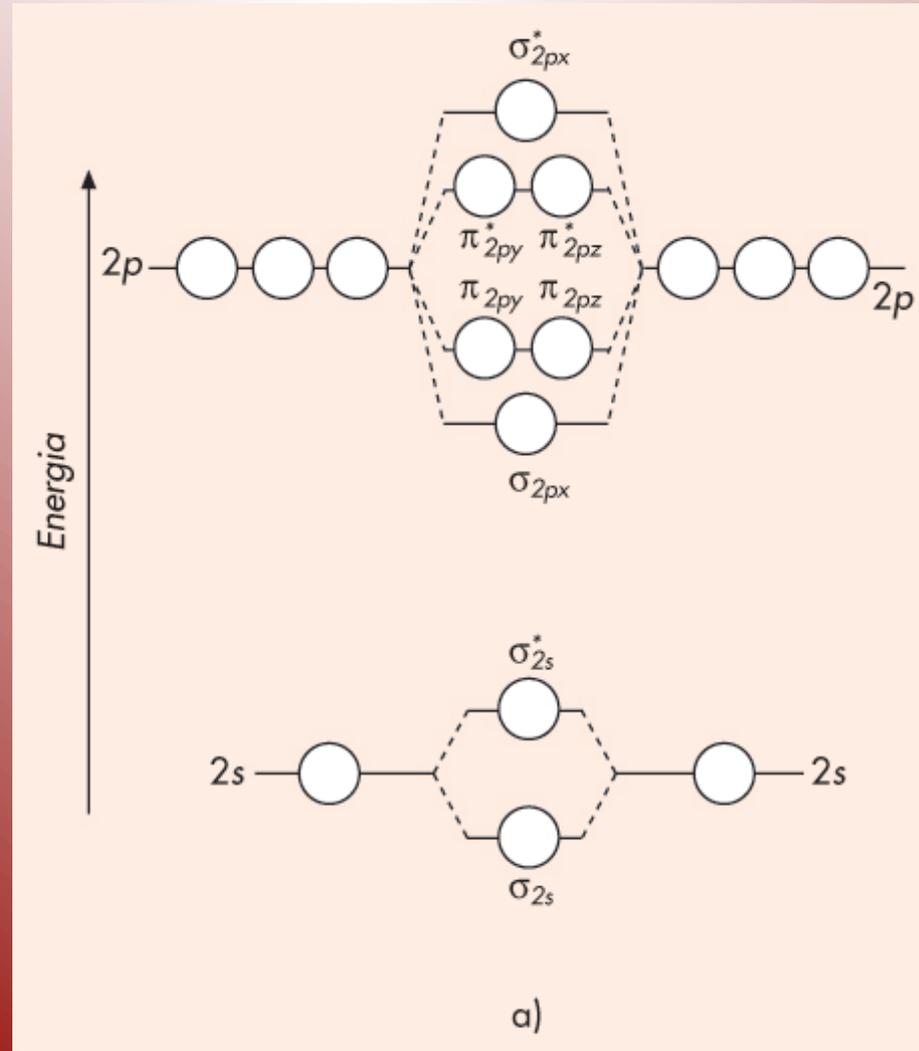
**Distribuzione degli elettroni negli orbitali  
molecolari delle molecole biatomiche omonucleari  
(X<sub>2</sub>) del primo periodo**





SAPIENZA  
UNIVERSITÀ DI ROMA

Energie degli orbitali molecolari di:  
a)  $O_2$ ,  $F_2$  e  $Ne_2$ ;



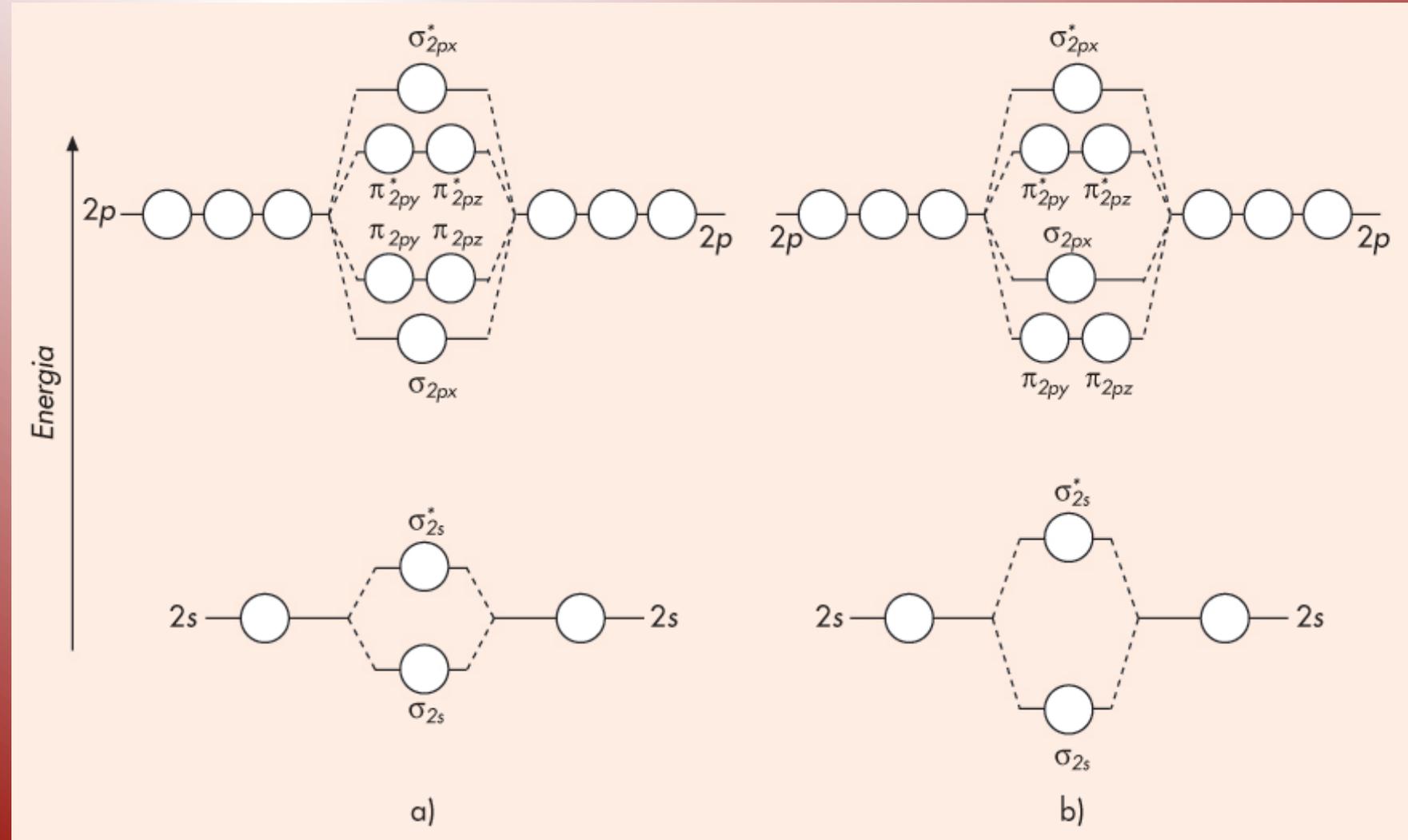


SAPIENZA  
UNIVERSITÀ DI ROMA

Energie degli orbitali molecolari di:

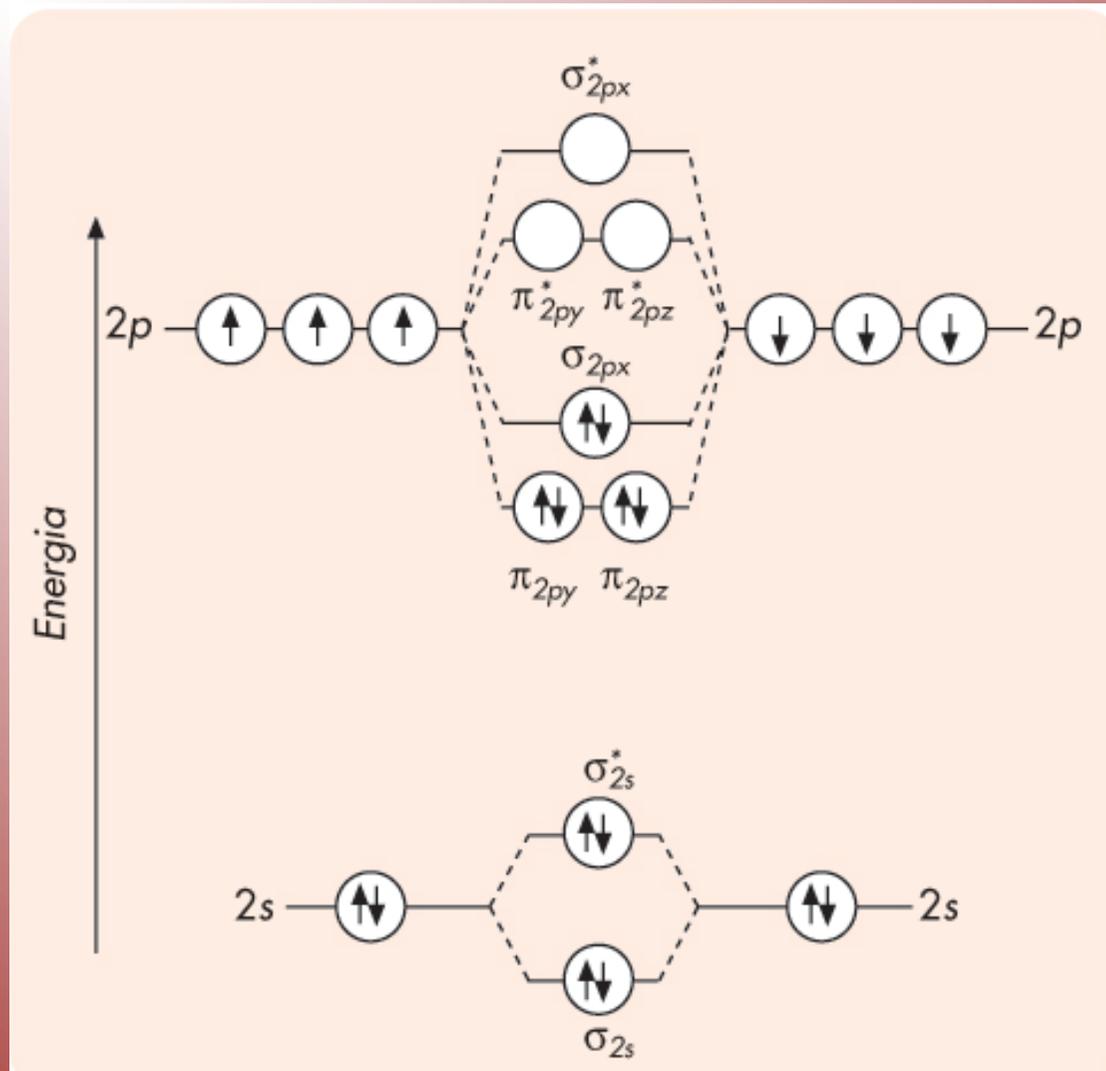
a)  $O_2$ ,  $F_2$  e  $Ne_2$ ;

b)  $Li_2$ ,  $Be_2$ ,  $B_2$ ,  $C_2$ ,  $N_2$



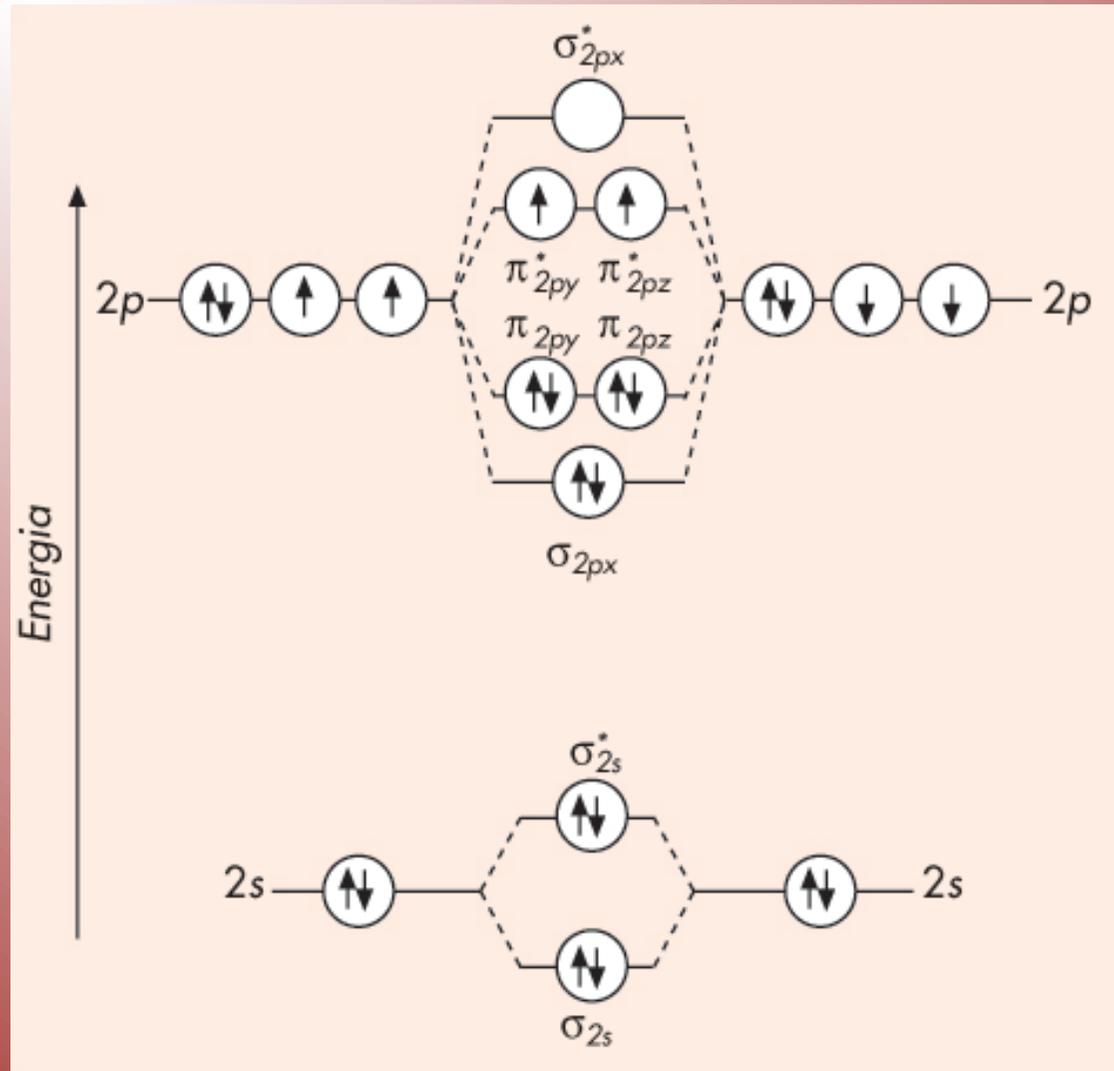


## Schema di distribuzione degli elettroni nella molecola N<sub>2</sub>



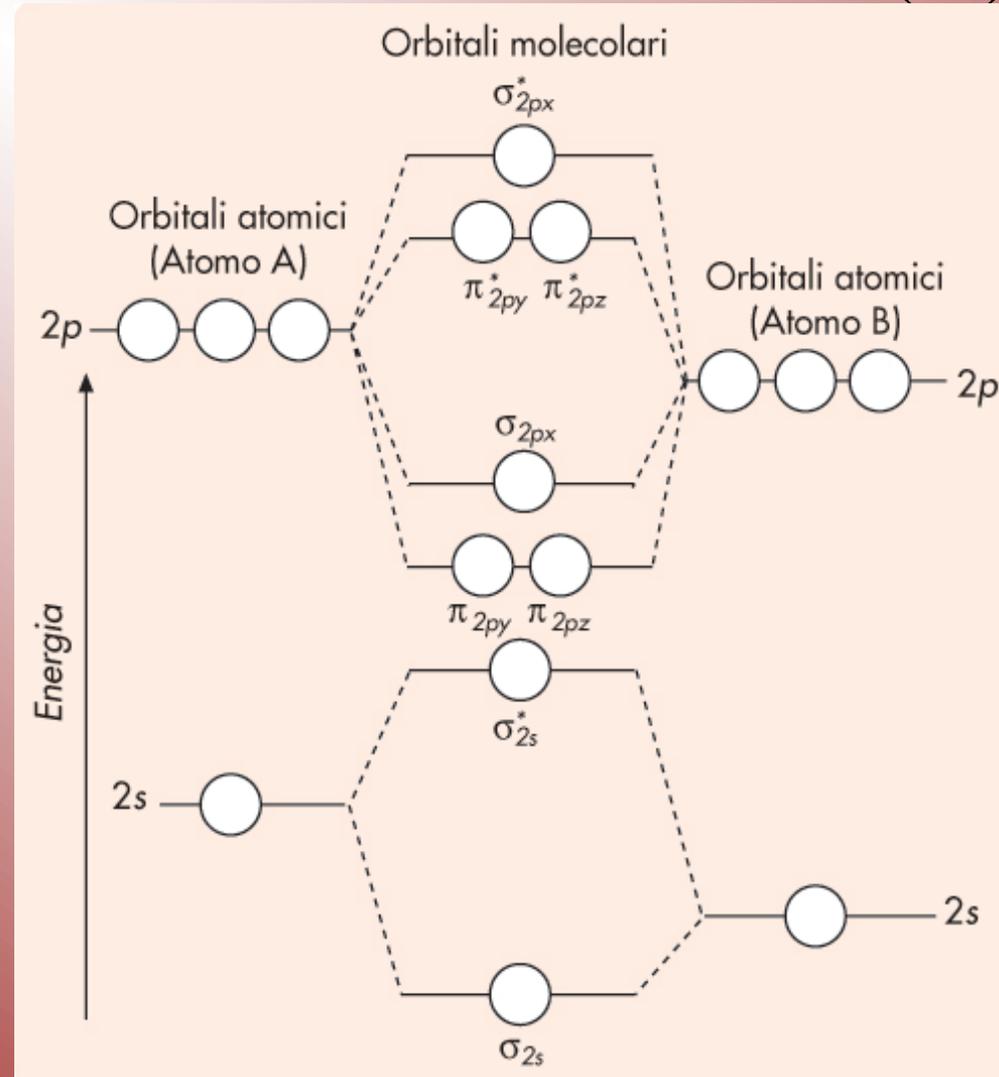


## Schema di distribuzione degli elettroni nella molecola O<sub>2</sub>



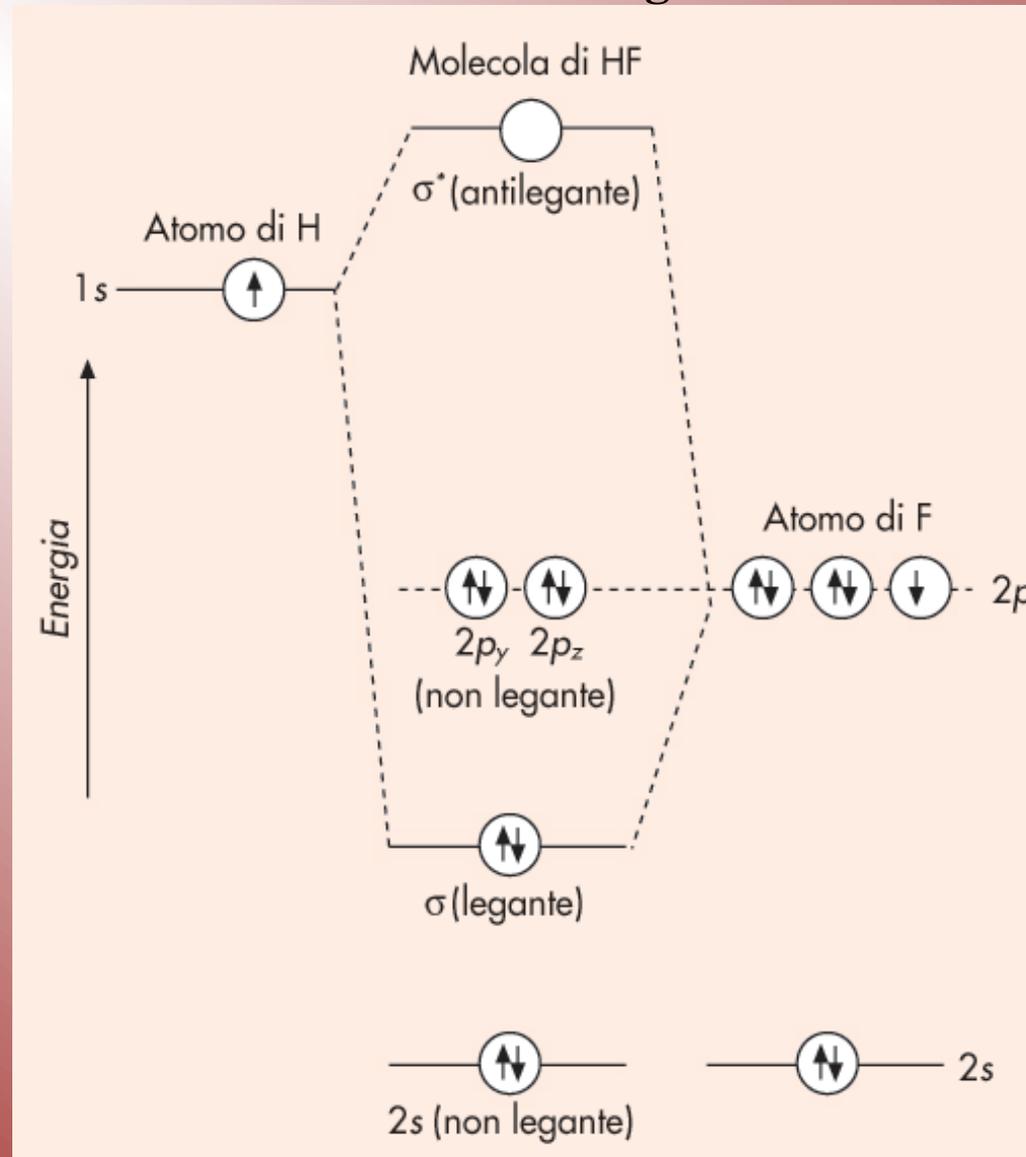


## Schema di distribuzione degli elettroni in una molecola biatomica eteronucleare (AB)





## Schema di distribuzione degli elettroni in HF

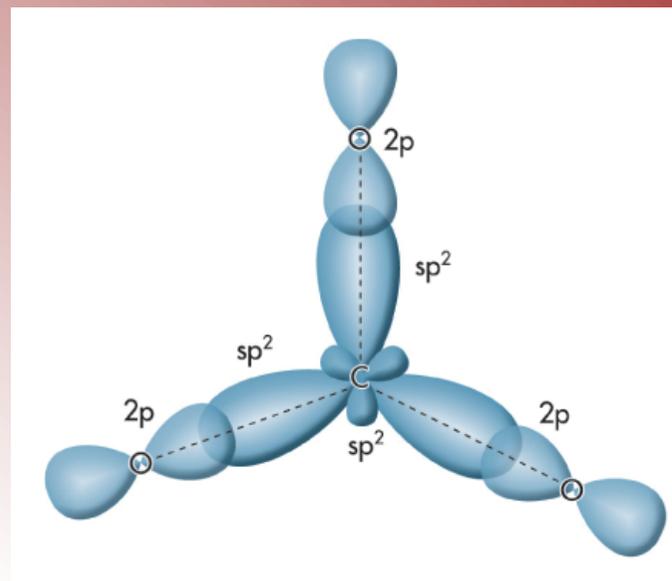




SAPIENZA  
UNIVERSITÀ DI ROMA

## Molecole con sistemi elettronici delocalizzati

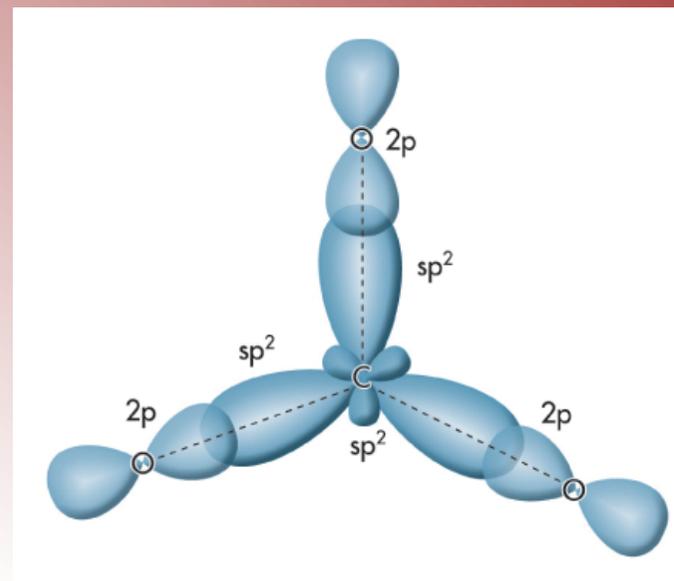
Struttura dello ione  $\text{CO}_3^{2-}$  ;  
Formazione dei legami  $\sigma$  C—O.



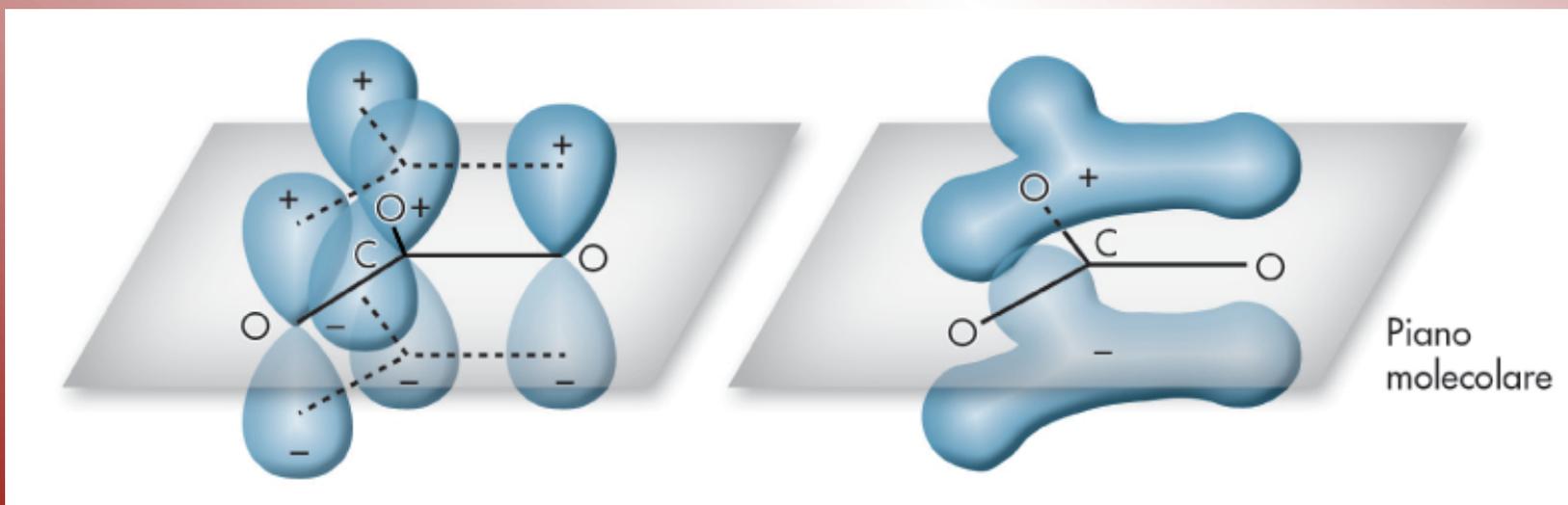


## Molecole con sistemi elettronici delocalizzati

Struttura dello ione  $\text{CO}_3^{2-}$  ;  
Formazione dei legami  $\sigma \text{C—O}$ .



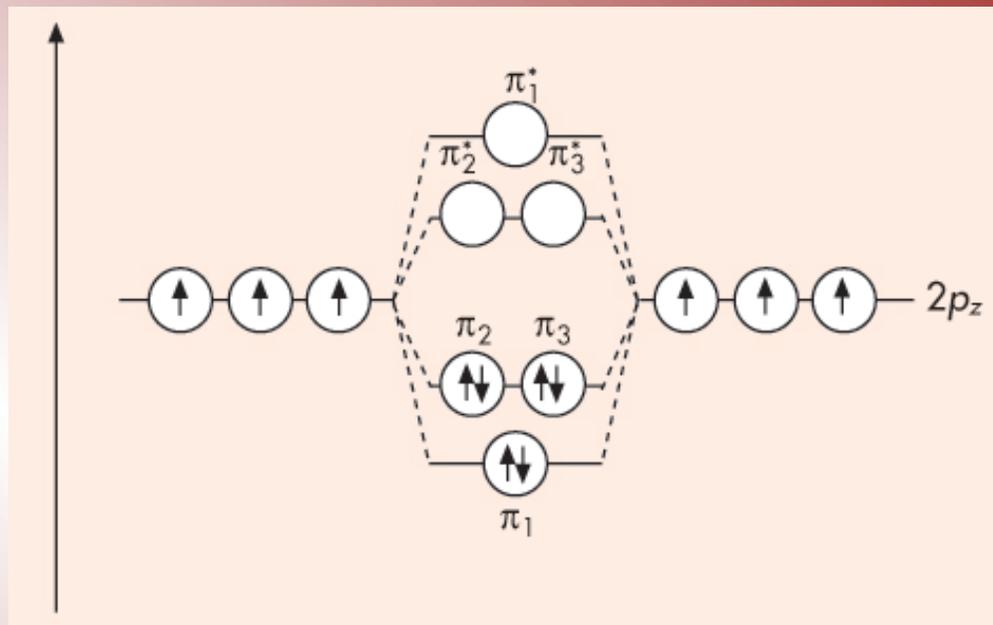
Orbitale molecolare delocalizzato  
dello ione  $\text{CO}_3^{2-}$





SAPIENZA  
UNIVERSITÀ DI ROMA

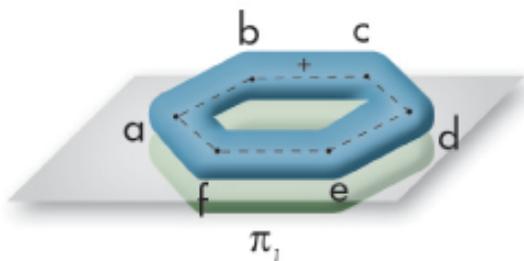
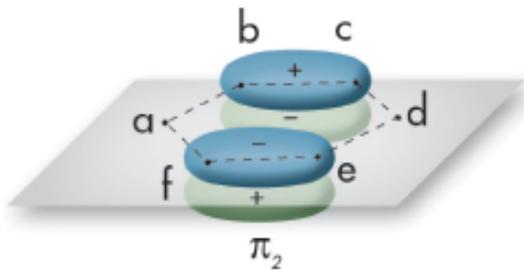
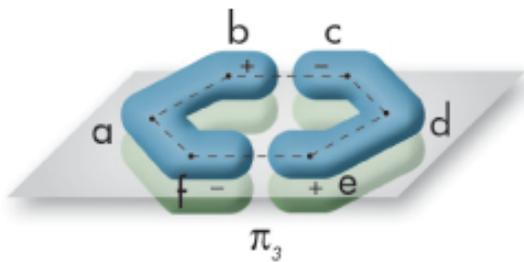
## Schema di distribuzione degli elettroni negli orbitali molecolari $\pi$ del benzene





SAPIENZA  
UNIVERSITÀ DI ROMA

## Orbitali molecolari $\pi$ di legame del benzene



## Schema di distribuzione degli elettroni negli orbitali molecolari $\pi$ del benzene

