

Orbitali molecolari di molecole triatomiche: CO₂.

Consideriamo infine il caso di una molecola triatomica, prendendo come esempio la molecola di anidride carbonica.

La molecola è lineare (cfr. VSEPR). Possiamo quindi costruire le combinazioni lineari considerando l'approssimazione che la sovrapposizione e quindi la formazione di orbitali molecolari riguarda solamente il livello $n=2$ ed in particolare gli orbitali di tipo $2p$ degli ossigeni e orbitali $2s$ e $2p$ del carbonio. Il principio con cui possiamo considerare le combinazioni degli orbitali atomici è quello di scegliere i segni in modo che non ci siano nodi per gli orbitali di legame di legame mentre risultino nodi internucleari negli orbitali di legame. Questi orbitali hanno energia minore quando la molecola è lineare.

La figura Figura 1 riporta lo schema con cui possono essere costruiti gli orbitali molecolari a partire da quelli atomici, mentre la Figura 2 riporta i relativi livelli energetici.

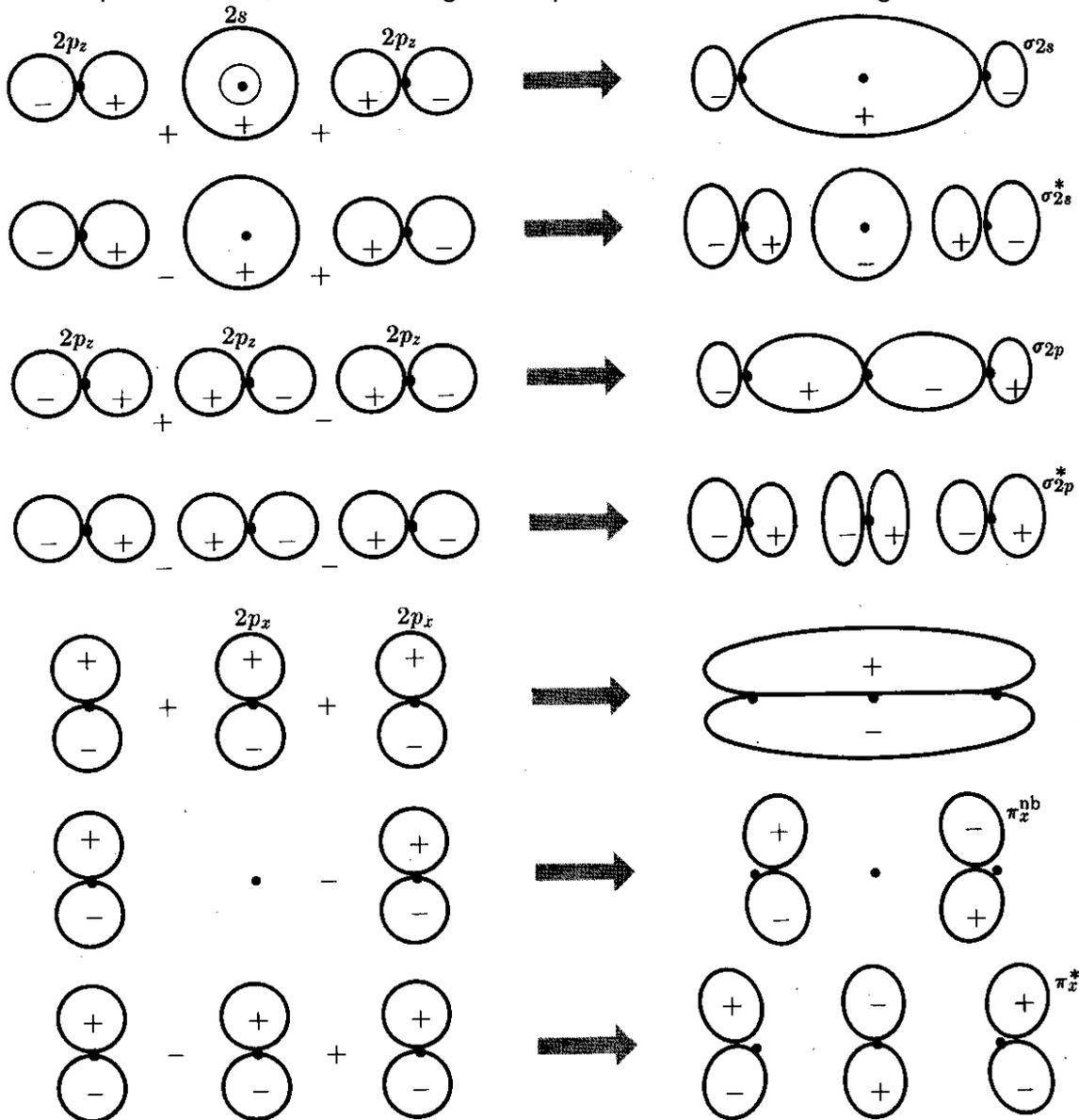


Figura 1 Rappresentazione schematica degli orbitali di legame, non legame e antilegame per la molecola CO₂. E' mostrata l'origine degli orbitali molecolari costruiti per combinazione lineare di orbitali atomici. Si noti che per semplicità non sono riportati i tre orbitali a simmetria π orientati lungo asse y .

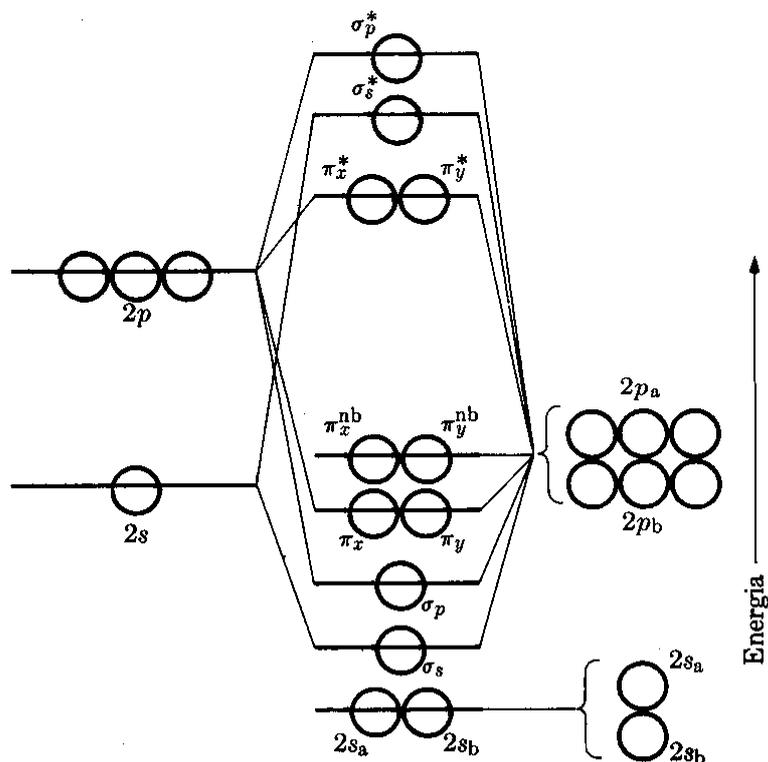


Figura 2. Diagramma energetico degli orbitali molecolari della molecola lineare CO_2 . Tale diagramma è valido anche per altre molecole lineari triatomiche.

Si noti che lo schema riportato in Figura 2 può essere utilizzato per altre molecole triatomiche sia quelle isoelettroniche (N_2O , N_3^- , CS_2 , OCS) che quelle che hanno meno di 16 elettroni di valenza (NCO , NCN).

Per molecole triatomiche con più di 16 elettroni si osserva che gli elettroni in eccesso andrebbero ad occupare gli orbitali di antilegame π_x^* aumentando l'energia del sistema.

Per minimizzare tale effetto si osserva in genere un piegamento della molecola in modo da rendere questi orbitali di tipo non legante.