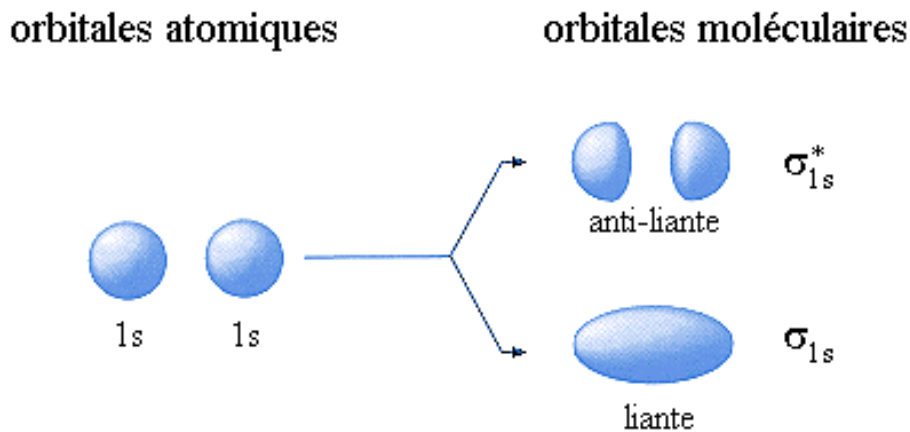


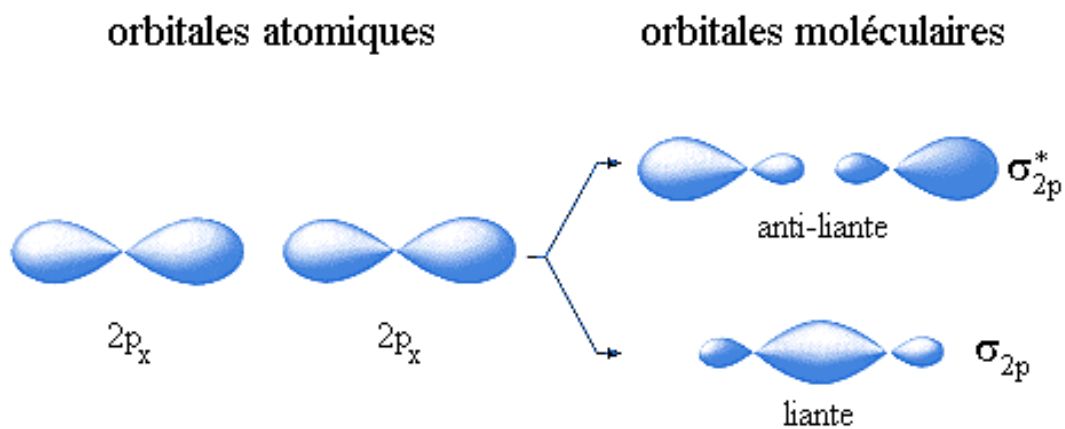
# Combinaison linéaire des orbitales atomiques (LCAO)

La combinaison linéaire de deux orbitales atomiques  $s$  conduit à deux orbitales moléculaires de symétrie cylindrique, appelées  $\sigma$ :

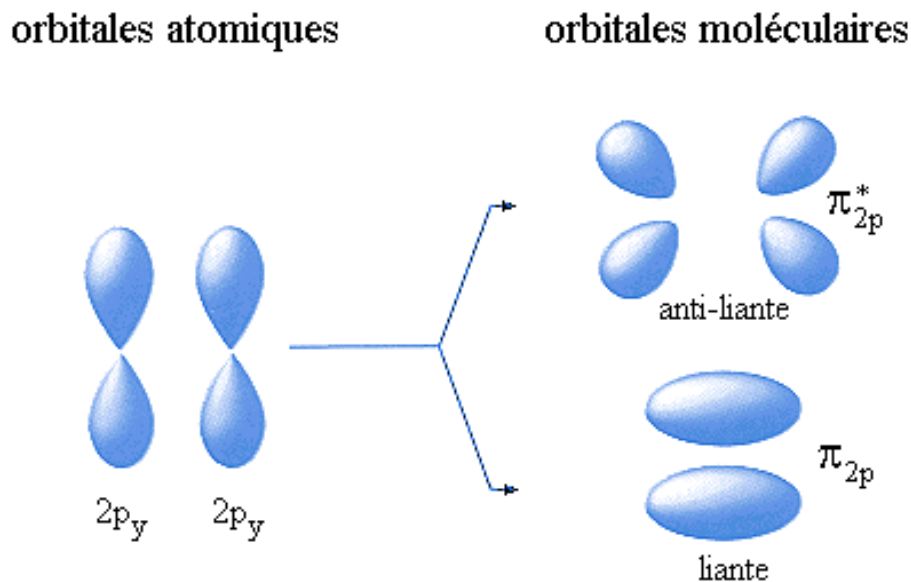


La combinaison linéaire de deux orbitales atomiques  $p$  conduit à deux orbitales moléculaires qui peuvent être:

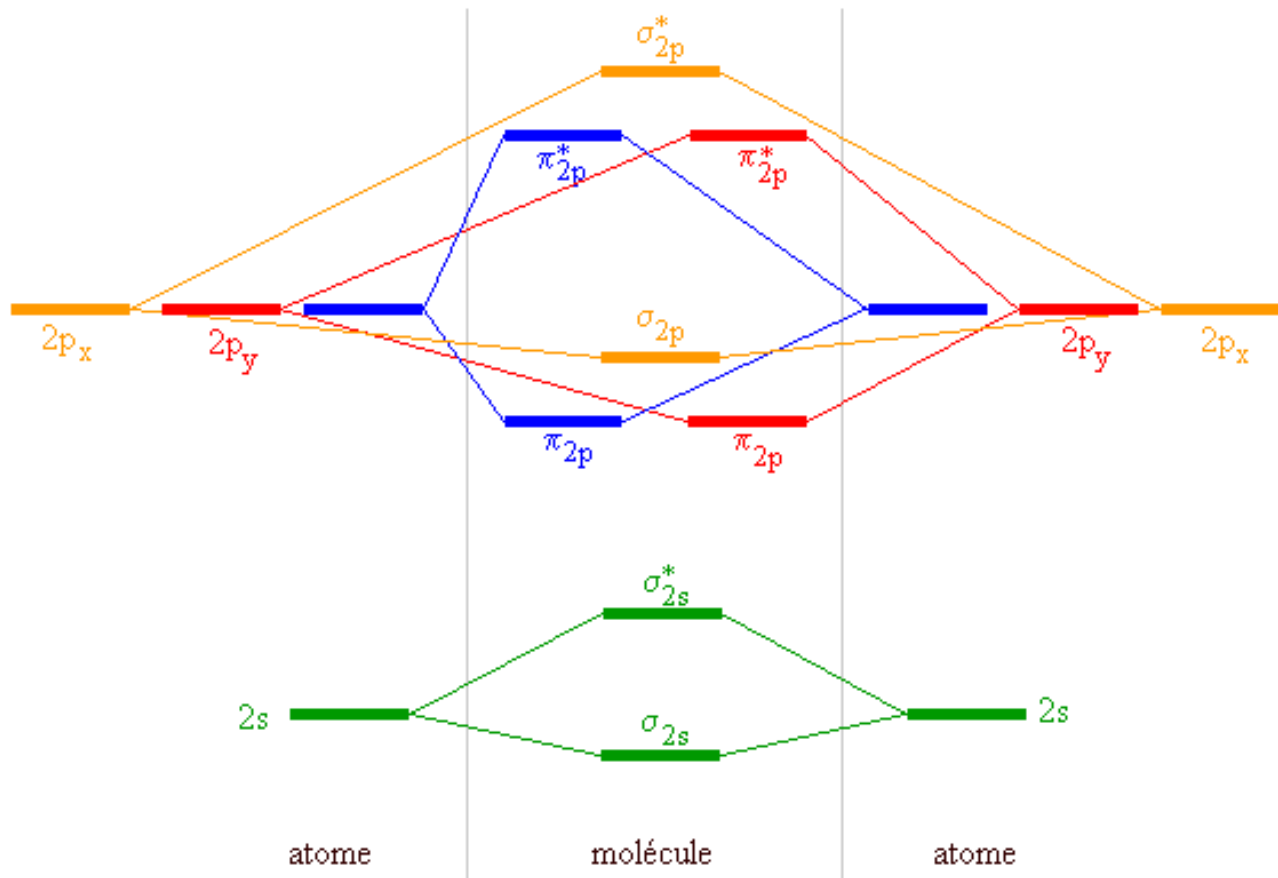
- de symétrie cylindrique (orbitale  $\sigma$ ) si les orbitales atomiques  $p$  étaient symétriques par rapport à l'axe passant par les deux noyaux:



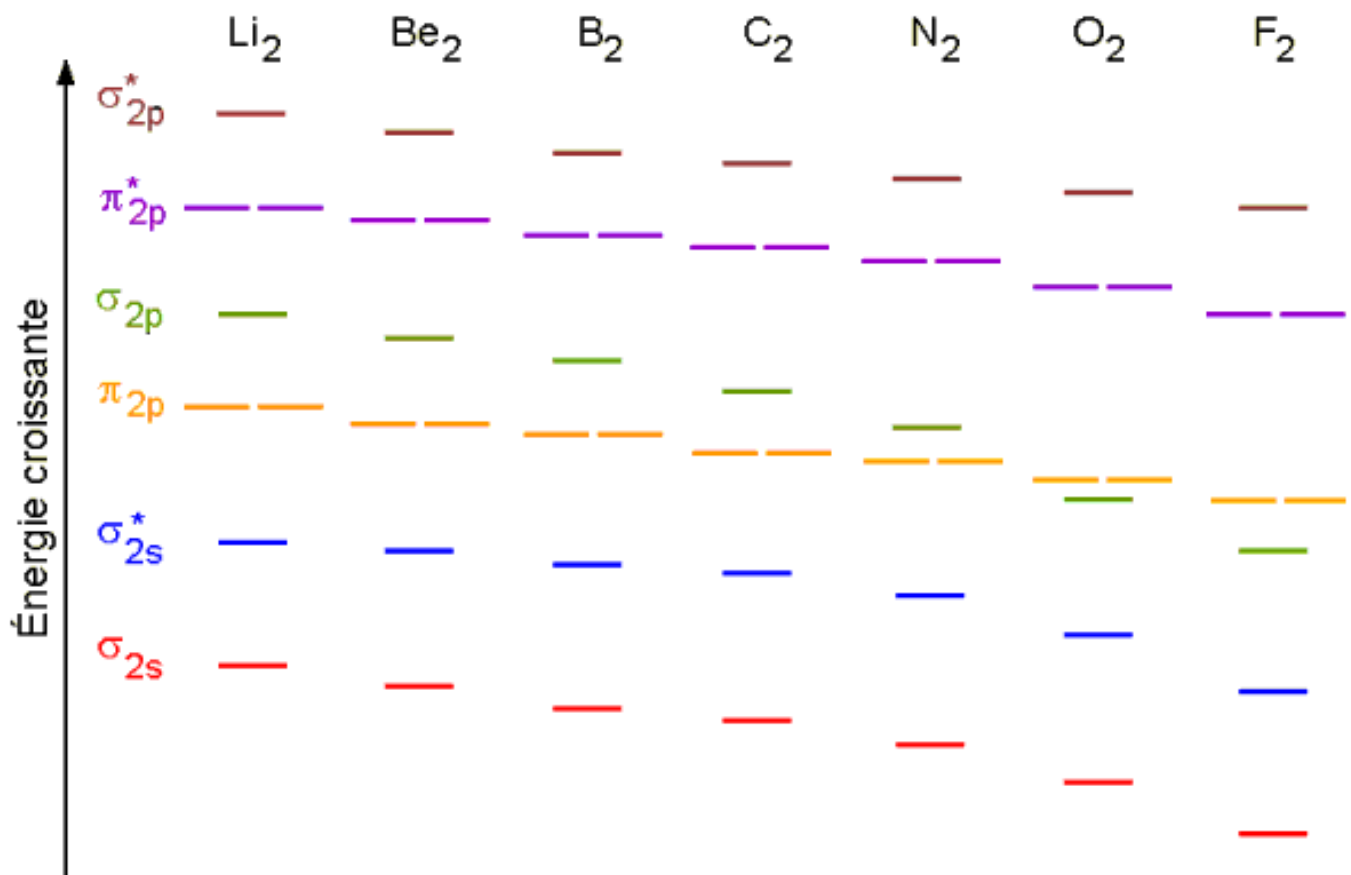
- de symétrie plane (orbitale  $\pi$ ) dans le cas contraire:



On représente les orbitales moléculaires et les orbitales atomiques qui leur donnent naissance par combinaison linéaire, sur un même diagramme d'énergie schématisé. Par exemple pour les molécules diatomiques homonucléaires construites à partir des premiers éléments de la deuxième période:



Le diagramme conserve les mêmes caractéristiques pour tous éléments de la période, mais les énergies relatives changent avec la charge du noyau:



On remarque que l'énergie de  $\pi$  est inférieure à celle de  $\sigma$  du lithium à l'azote, mais l'ordre est inversé à partir de l'oxygène.