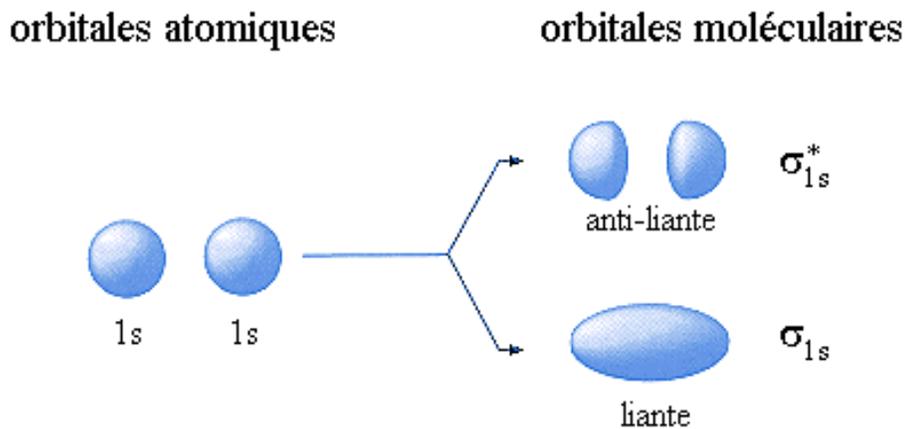


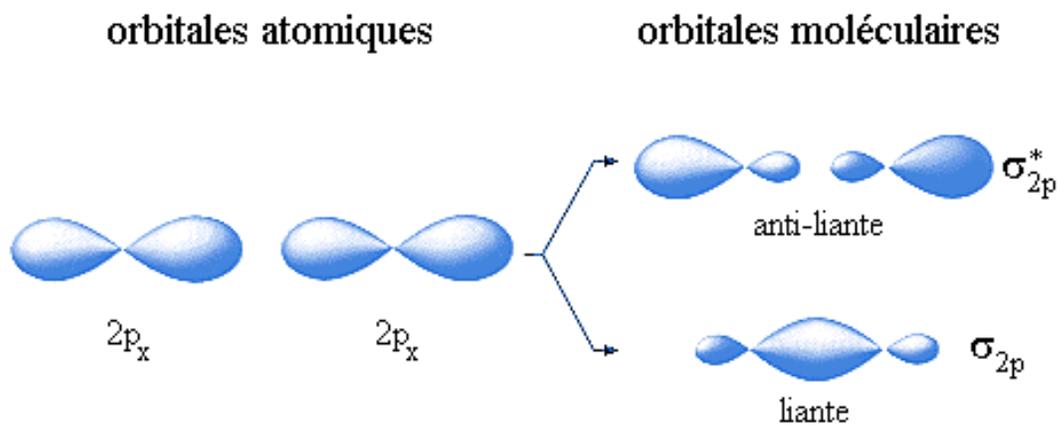
Combinaison linéaire des orbitales atomiques (LCAO)

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

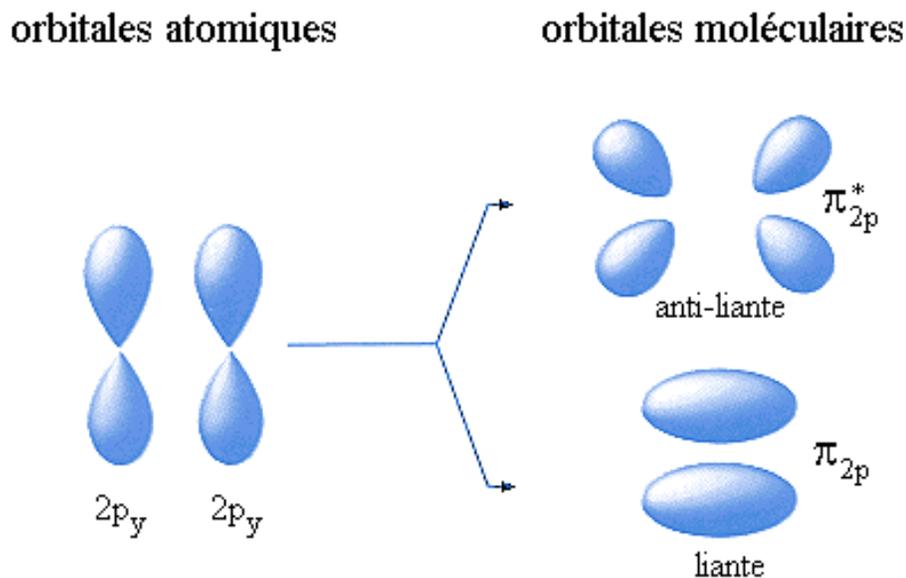


La combinaison linéaire de deux orbitales atomiques p conduit à deux orbitales moléculaires qui peuvent être:

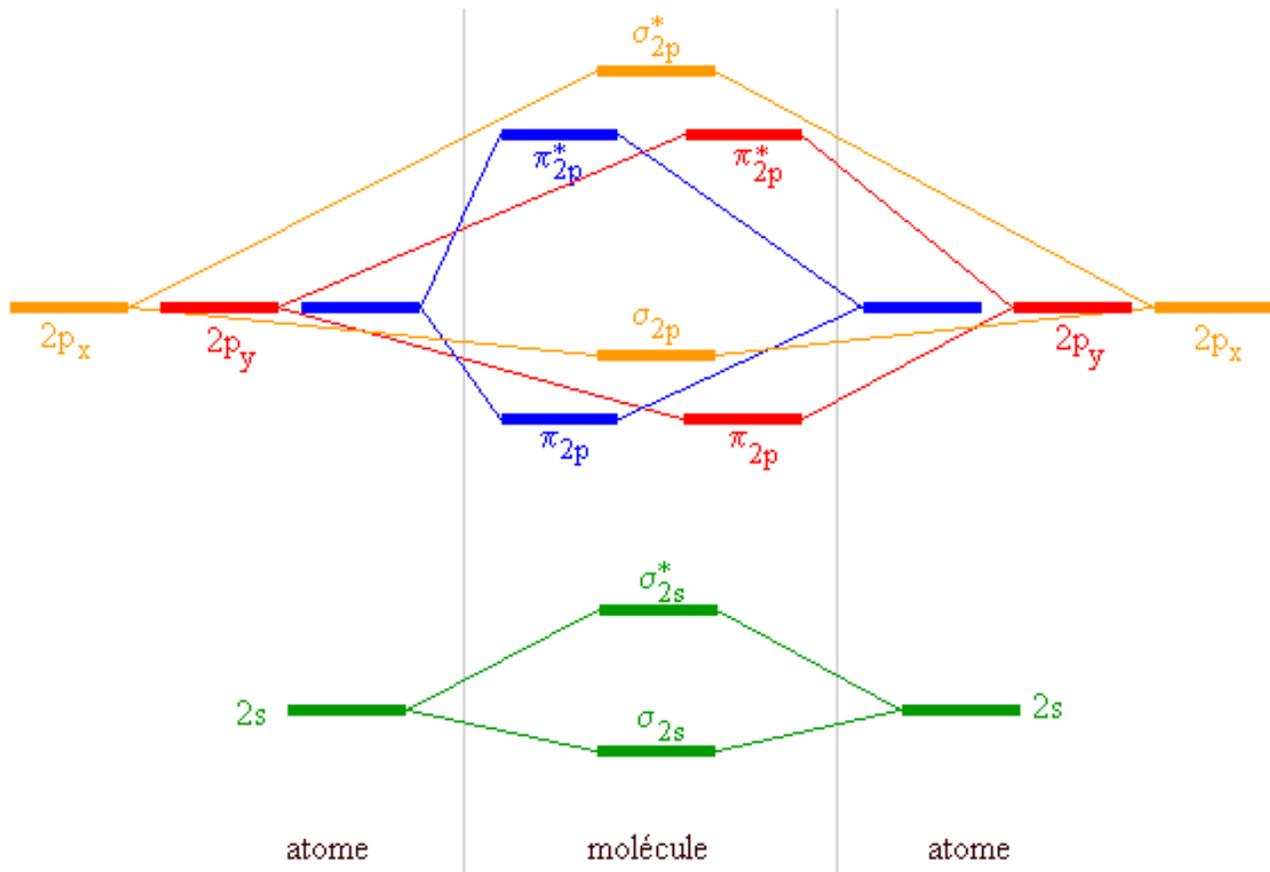
- de symétrie cylindrique (orbitale σ) si les orbitales atomiques p étaient symétriques par rapport à l'axe passant par les deux noyaux:



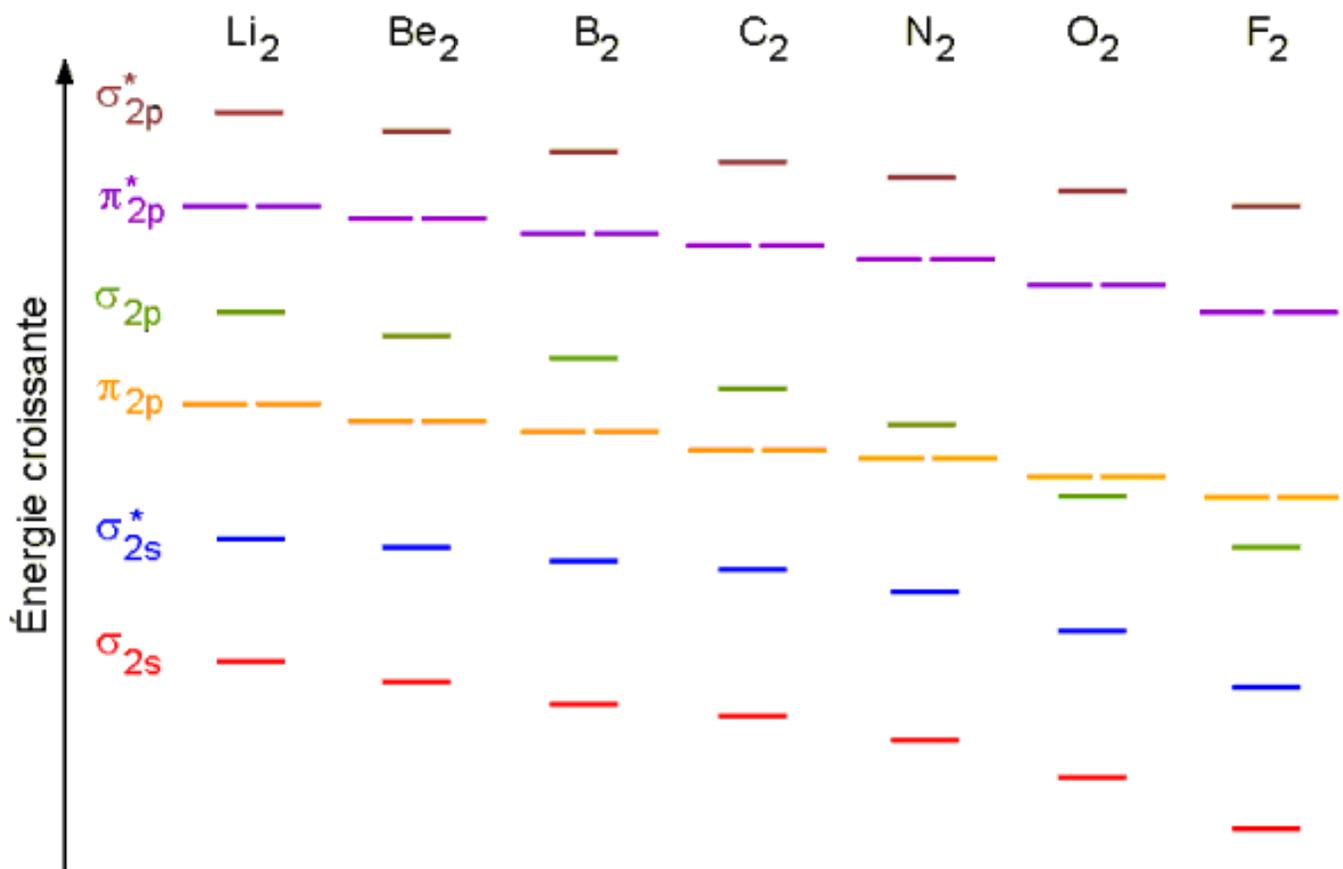
- de symétrie plane (orbitale π) dans le cas contraire:



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 π est inférieure à celle de σ du lithium à l'azote, mais l'ordre est inversé à partir de l'oxygène.