

In generale:

il **numero di orbitali molecolari** (MO) formati è sempre uguale al numero di orbitali atomici che si combinano.

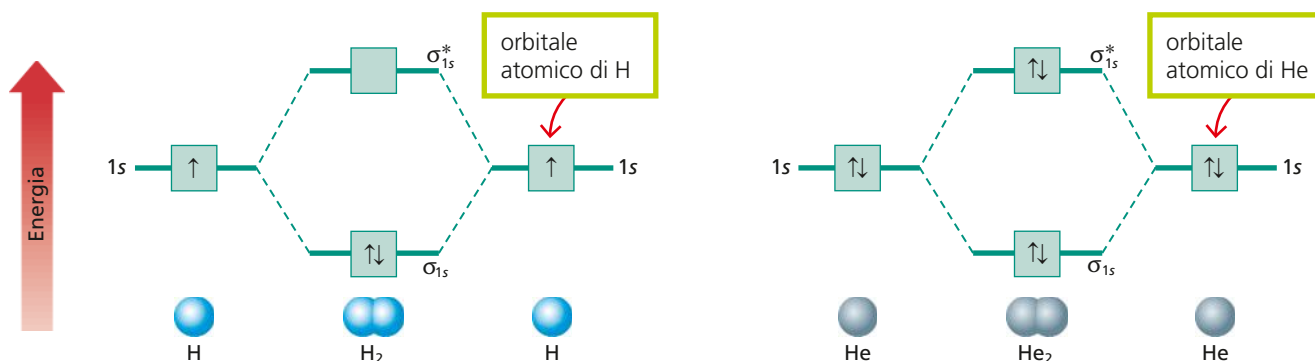
Quando gli elettroni occupano gli orbitali molecolari, riempiono per primi gli orbitali di legame a energia più bassa. Le regole di riempimento degli MO sono identiche a quelle che valgono per gli orbitali atomici: *gli elettroni si distribuiscono fra gli orbitali con la stessa energia (regola di Hund); due elettroni possono occupare lo stesso orbitale solo se hanno spin appaiati (principio di esclusione di Pauli)*.

Vediamo ora come la teoria dell'orbitale molecolare spiega perché solo alcune molecole possono formarsi. La **figura 9.21 A** riporta il diagramma dei livelli di energia degli orbitali molecolari della molecola H_2 . A sinistra e a destra sono indicate le energie degli orbitali atomici $1s$ isolati, al centro quelle degli orbitali molecolari. La molecola H_2 possiede due elettroni ed entrambi occupano l'orbitale σ_{1s} .

Ma che cosa accade quando due atomi di elio interagiscono fra loro e perché non si forma una molecola He_2 stabile? La **figura 9.21 B** riporta il diagramma delle energie per He_2 , in cui gli orbitali di legame e di antilegame sono completamente occupati. Poiché l'energia dell'orbitale di antilegame è più elevata rispetto agli orbitali atomici di partenza, l'energia complessiva di He_2 è maggiore dell'energia dei due atomi isolati. Questo crea una forte destabilizzazione per cui «la molecola» si rompe immediatamente.

In generale, gli effetti degli elettroni di antilegame (quelli che occupano gli orbitali di antilegame) annullano gli effetti di un ugual numero di elettroni di legame: le molecole che hanno lo stesso numero di elettroni di legame e di antilegame sono instabili.

Figura 9.21 ▶ Diagrammi dei livelli di energia degli orbitali molecolari: (A) per la molecola H_2 ; (B) per la molecola He_2 .



L'ordine di legame

L'ordine di legame è definito come numero di coppie di elettroni condivise fra due atomi. La condivisione di una coppia di elettroni dà, quindi, un legame singolo con ordine di legame 1, due coppie danno un doppio legame con ordine di legame 2 e tre coppie un triplo legame con ordine di legame 3.

Per descrivere gli MO in termini analoghi, l'ordine di legame si calcola:

$$\text{ordine di legame} = \frac{(\text{numero di } e^- \text{ di legame}) - (\text{numero di } e^- \text{ di antilegame})}{2}$$

Per la molecola H_2 abbiamo:

$$\text{ordine di legame} = \frac{2 - 0}{2} = 1$$

Un ordine di legame 1 corrisponde a un legame singolo.