

RESULTATS MATHÉMATIQUES : COMBINAISONS LINÉAIRES ET FORCE DE L'INTERACTION

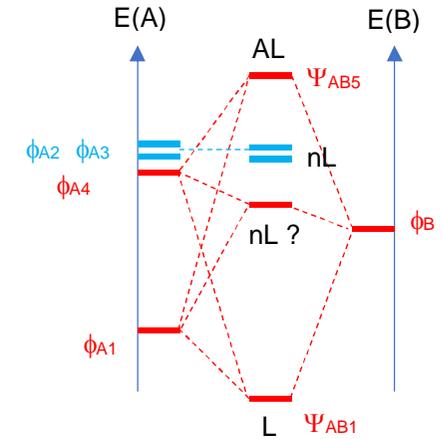
Les combinaisons linéaires entre OA de même gpe de symétrie sont caractérisées par des coefficients :

Soit N OA des atomes A et B notées $\phi_{A1} \phi_{A2} \phi_{A3} \phi_{A4}$ et ϕ_B par exemple. $N = 5$

=> N OM pour la structure A-B $\Psi_{AB1} \Psi_{AB2} \Psi_{AB3} \Psi_{AB4} \Psi_{AB5}$ $N = 5$ OM

Expressions :

$$\begin{aligned} \Psi_{AB1} &= \mathbf{C}_{11} \cdot \phi_{A1} + \mathbf{C}_{14} \cdot \phi_{A4} + \mathbf{C}_{1B} \cdot \phi_B \\ \Psi_{AB2} &= \mathbf{C}_{21} \cdot \phi_{A1} + \mathbf{C}_{24} \cdot \phi_{A4} + \mathbf{C}_{2B} \cdot \phi_B \\ \Psi_{AB3} &= \cdot \phi_{A2} \\ \Psi_{AB4} &= \cdot \phi_{A3} \quad \text{Identiques aux OA sources : non liantes} \\ \Psi_{AB5} &= \mathbf{C}_{51} \cdot \phi_{A1} + \mathbf{C}_{54} \cdot \phi_{A4} + \mathbf{C}_{5B} \cdot \phi_B \end{aligned}$$



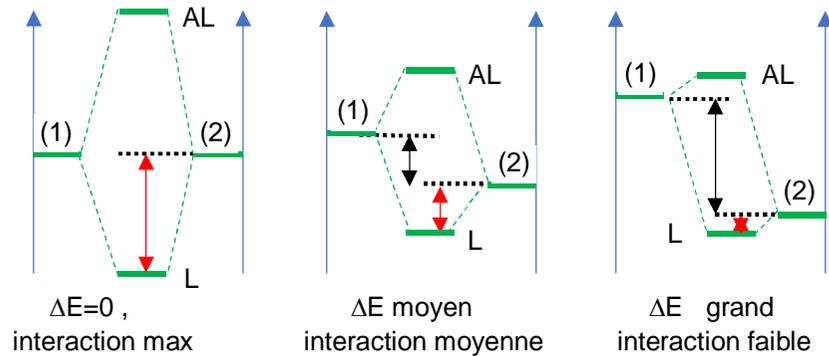
Les coefficients en gras et majuscule sont plus grands que les autres < - > l'NRJ de ces OM est plus proche de celle de l'OA correspondante

< - > les e- éventuellement présents dans ces OM seront plus localisés sur ces OA à grand coefficient.

FORCE DE L'INTERACTION

Critère énergétique

ΔE minimal = interaction maximale

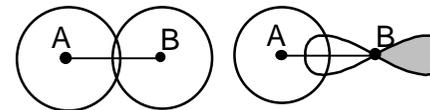


$\Delta E > 15$ eV : interaction négligeable

$$\begin{aligned} \Psi_L &= 0,5 (1) + 0,5 (2) & \Psi_L &= 0,3 (1) + 0,7 (2) & \Psi_L &= 0,1 (1) + 0,9 (2) \\ \Psi_{AL} &= 0,5 (1) - 0,5 (2) & \Psi_{AL} &= 0,7 (1) - 0,3 (2) & \Psi_{AL} &= 0,9 (1) - 0,1 (2) \end{aligned}$$

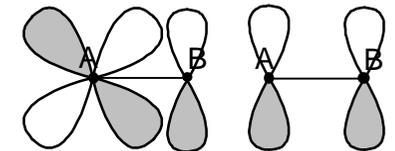
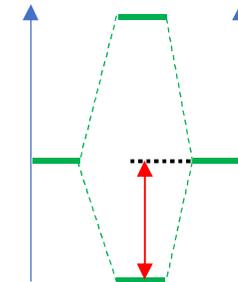
Critère de recouvrement

volumes superposés max = interaction max



Recouvrements maximum selon l'axe de la liaison

(recouvrement σ)



recouvrement plus faible de part et d'autre de l'axe

(recouvrement π)

