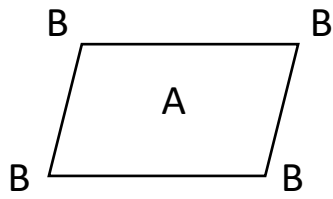


TOM AB₄ on A és element de transició.



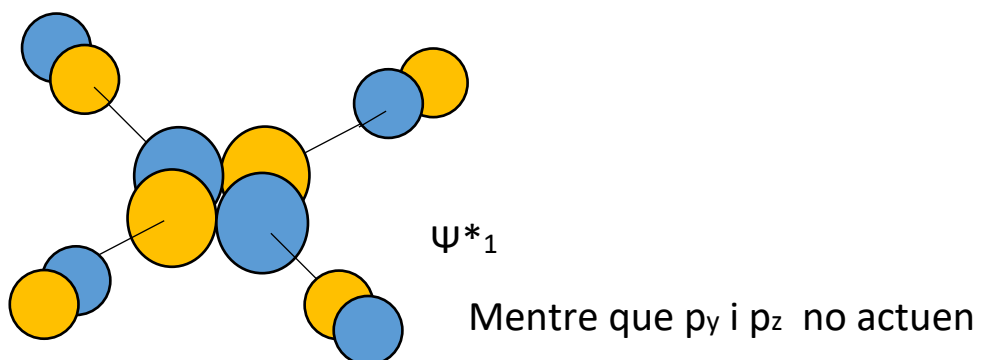
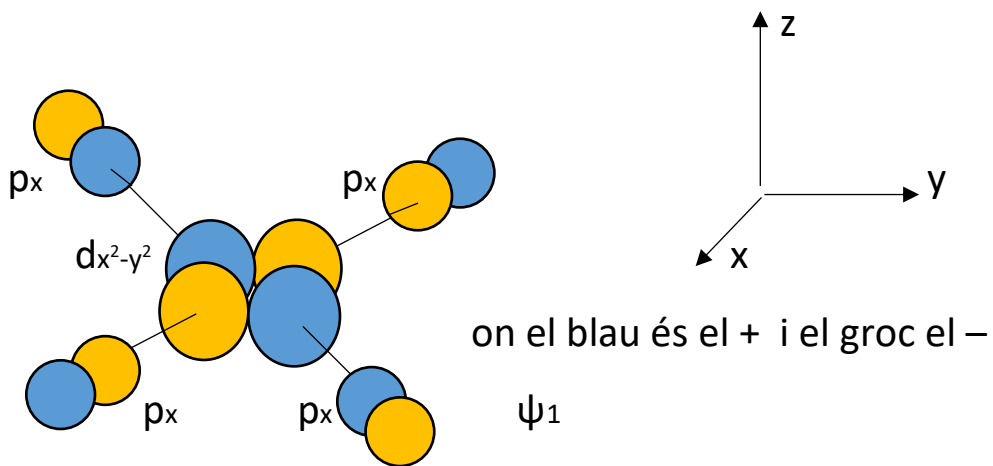
A: $d_{x^2-y^2}$, d_{z^2} , d_{xy} , d_{xz} , d_{yz}

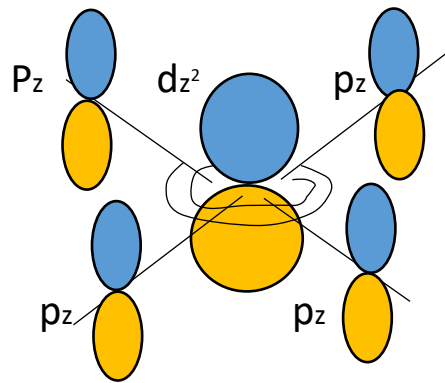
B: $p_x, p_y, p_z \times 4$

17 Orbitals Atòmics

(Els s_B no els incloc).

Per tant obtindrem 17 Orbitals Moleculars



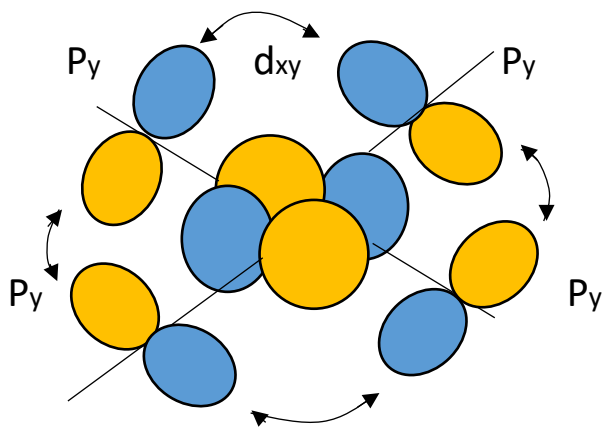
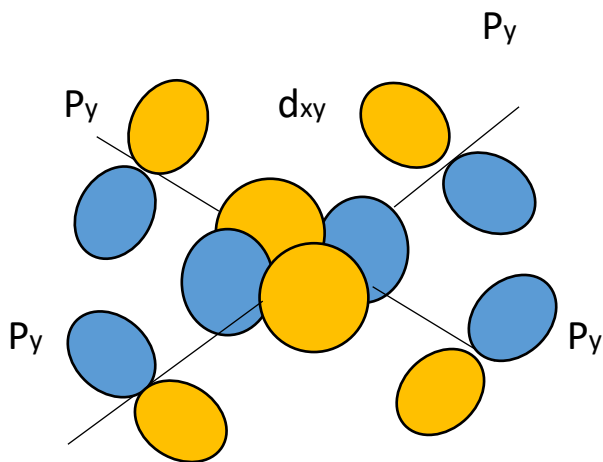


Ψ_2

i la seva corresponent Ψ^*_2
(que no represento)

mentre que p_x i p_y no actuen.

Ψ_3 :



D'altra banda els p_x i els p_z continuen com a no enllaçants.

Ara la $d_{xz} + 4 p_z$

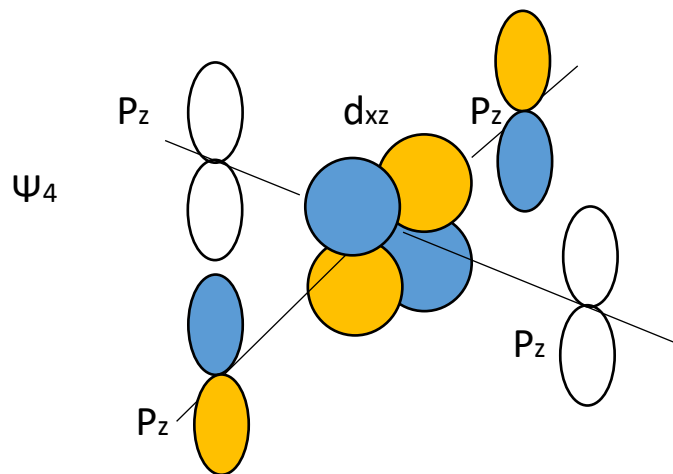


FIGURA 1

Veiem que només enllaçen 2 dels 4 P_z (es tracta d'un enllaç π feble). Aleshores

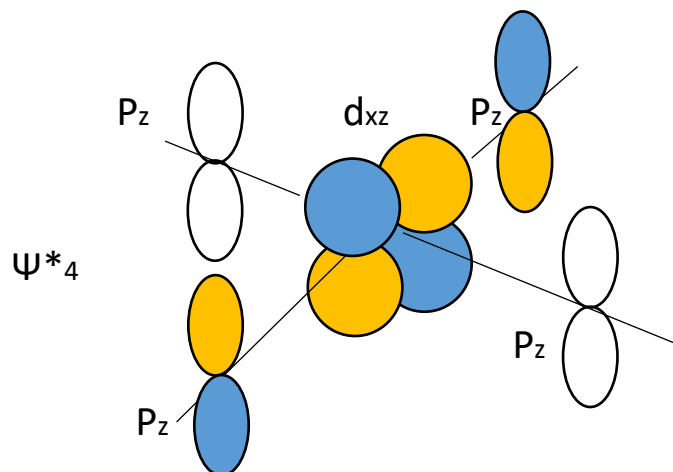
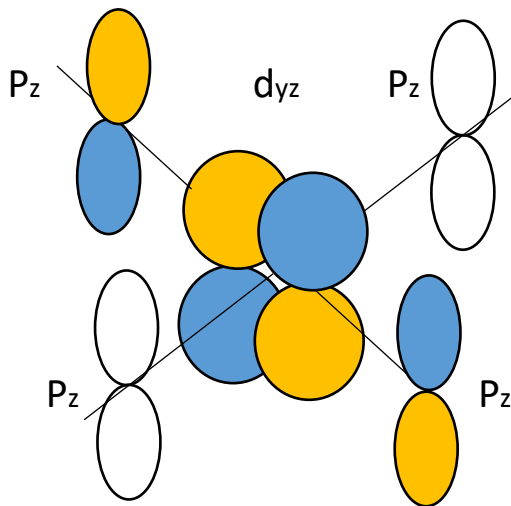


FIGURA 2

dividim els 4 P_z per 2 en ambdós figures de la forma

$\psi_4/2 + \psi^*_4/2$ de manera que només obtenim una funció d'ona molecular sencera "de 4 enllaços".

Recordem que P_x i P_y no enllaçen, tampoc



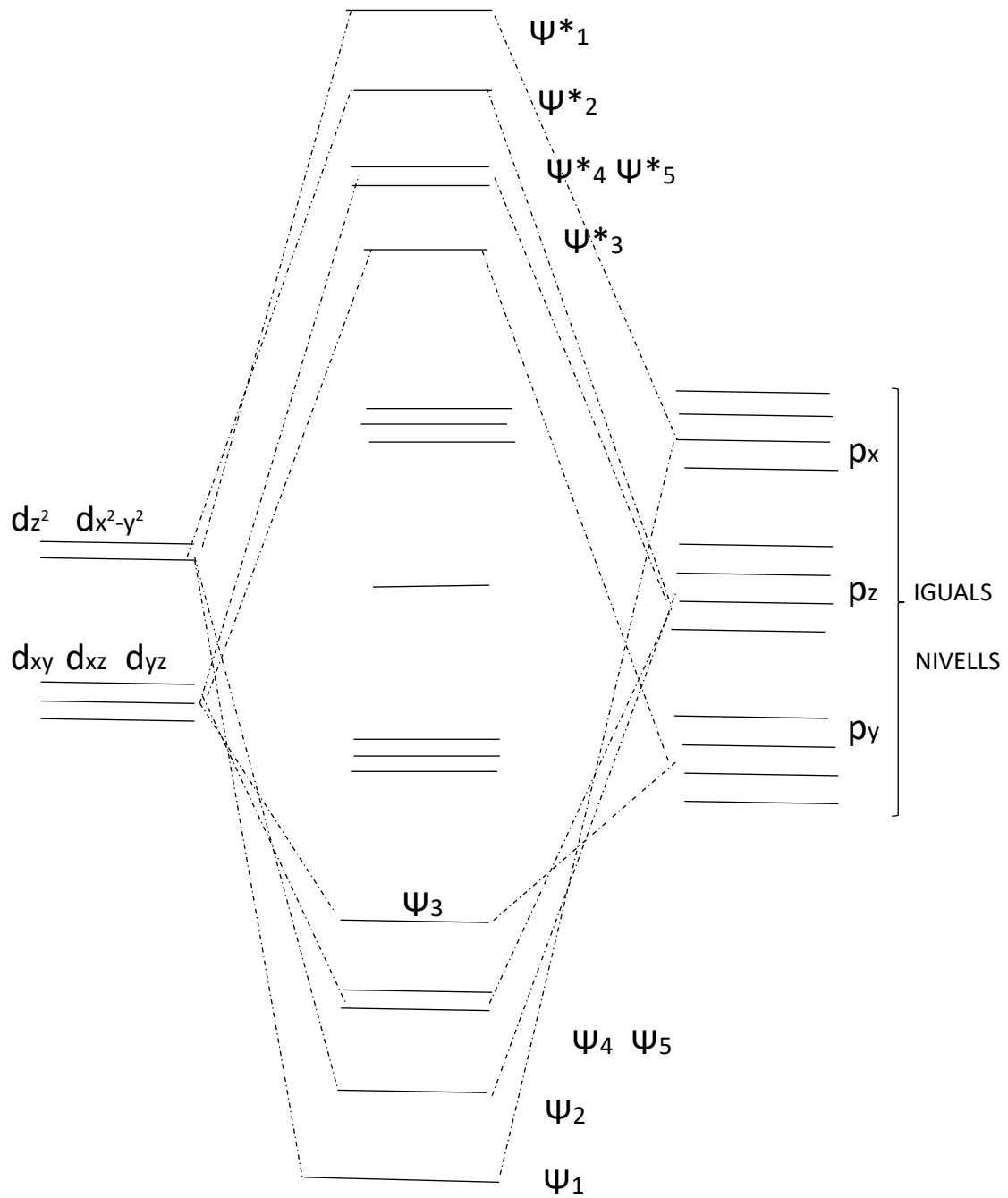
Succeeix el mateix que en el cas de d_{xz} .

ψ_5 i ψ^*_5

També veiem com P_x i P_y només es compten com a no enllaçants.

De tots ells, l'únic enllaç σ és ψ_1 , mentre que σ^* , antienllaçant, és ψ^*_1 .

Els altres 4 casos són π i π^* (no tan forts com el σ o el σ^*).



En global sumen 17 O.M.

En aquesta representació TOM cal recordar que, tal i com hem vist en els dibuixos superiors dels orbitals, $d_{zy} + 4p_z$ i

$d_{yz} + 4p_z$ experimenten només mig “solapament constructiu”, per tant no són tan estables com els altres nivells moleculars.

Són Ψ_4 i ψ^*_4 i Ψ_5 i ψ^*_5 .