

LC2 : LA LIAISON COVALENTE

Diagramme d'orbitales moléculaires de molécules diatomiques

Gabriel BALAVOINE, Timothée AUDINET

23 septembre 2020

Limites du modèle de Lewis

- Energie des liaisons carbones-carbones
- Longueurs de liaisons du dioxygène
- Paramagnétisme de l'oxygène

<https://youtu.be/KcGEev8qulA?t=94>

Méthode pour construire un diagramme d'orbitales moléculaires

1. Inventorier et représenter les orbitales de valence des atomes
2. Étudier les symétries de toutes les orbitales par rapport à des plans de symétrie de la molécule
3. Repérer les orbitales qui peuvent interagir entre elles
4. 2 orbitales atomiques en interaction, forment deux orbitales moléculaires : une liante et une anti-liante
5. Construire le diagramme en combinant les orbitales atomiques

Application au diagramme de H_2

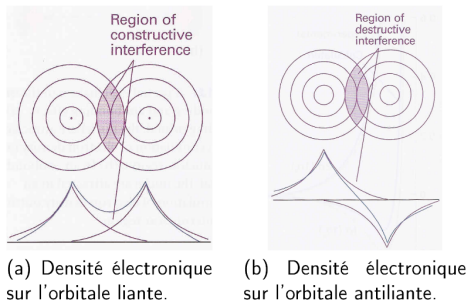


Figure 1: Densité électronique lors de l'interaction entre deux orbitales atomiques (*Atkins*, p. 371)

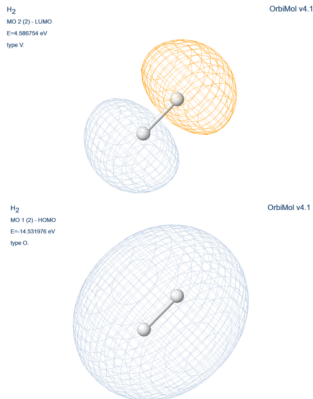


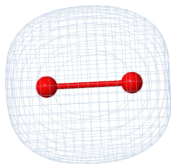
Figure 2: Orbitales moléculaires de la molécule H_2

Méthode pour construire un diagramme d'orbitales moléculaires

1. Inventorier et représenter les orbitales de valence des atomes
2. Étudier les symétries de toutes les orbitales par rapport à des plans de symétrie de la molécule
3. Repérer les orbitales qui peuvent interagir entre elles
4. 2 orbitales atomiques en interaction, forment deux orbitales moléculaires : une liante et une anti-liante
5. Construire le diagramme en combinant les orbitales atomiques

Application au diagramme de O_2

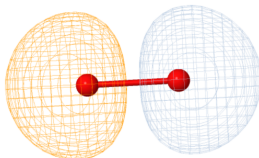
O_2
MO 1 (R)
E=-43.167077 eV
type O.



(a) Orbitale $1\sigma_g$.

OrbiMol v4.1

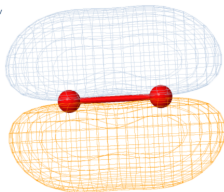
O_2
MO 2 (R)
E=-33.027293 eV
type O.



(b) Orbitale $2\sigma_u$.

OrbiMol v4.1

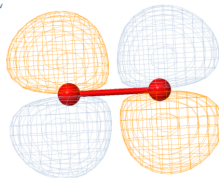
O_2
MO 5 (R)
E=-18.943488 eV
type O.



(a) Orbitale $1\pi_u$.

OrbiMol v4.1

O_2
MO 7 (R) - HOMO
E=-12.877791 eV
type O.



(b) Orbitale $2\pi_g$.

OrbiMol v4.1

Diagramme d'orbitales de O_2^+ et O_2^-

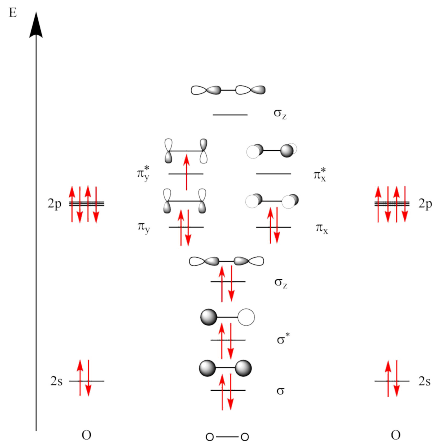


Figure 3: Diagramme d'orbitales moléculaires de O_2^+ (i = 2, 5)

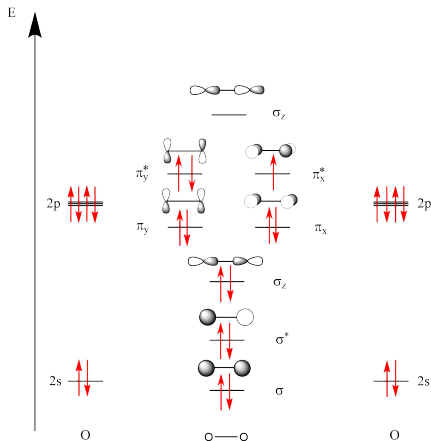


Figure 4: Diagramme d'orbitales moléculaires de O_2^- (i = 1, 5)