

LC 2 : Liaison covalente

Element imposé : diagramme orbitalaire, enthalpie de liaison, Théorie de Lewis, résonnance, géométrie des molécules

Niveau : L1/L2

Biblio : - Structure électronique des molécules, tome 1, Yves Jean

- Cours M. Vérot « Chimie orbitalaire »
- Chimie tout-en-un PC-PC*, Fosset
- Molecular orbitals and organic chemical reactions, Fleming

Pré-requis : - OA (L2)

- Equation de Schrödinger (L2)
- Règles de remplissage des orbitales (L1)
-

Intro :

Liaison covalente (déf IUPAC) : région de densité électronique relativement élevée entre 2 noyaux qui résulte au moins en partie du partage des électrons et donne naissance à une force attractive et à une distance internucléaire caractéristique.

→ Energie liaison covalente est d'environ 200 à 800 kJ/mol (donner exemples) et longueur = quelques angstrom

I) Représentation de la liaison covalente

A) Théorie de Lewis (1915)

(cf Jean chap 1.2 : p. 4-12)

→ Structure de Lewis ; liaison covalente entre 2 atomes vient du partage de 2 électrons de valence (soit de manière égale : 1 électron/ atome ; soit les 2 électrons viennent d'un doublet libre d'un seul des 2 atomes)

→ Règle de l'octet, charge formelle

→ Liaison peut être polarisée (moment dipolaire cf Jean p. 11-12)

Tr : Cependant cette vision simplifiée n'est parfois pas suffisante (ex : ion carbonate ou benzene Jean p. 13-14)

B) Résonnance et mésomérie

(cf Jean chap 1.3)

→ *Molécule conjuguée* = avec système pi délocalisé = liaisons doubles « conjuguées »

→ la *mésomérie* désigne une délocalisation d'électrons dans les molécules conjuguées. On la représente par une combinaison virtuelle de structures aux électrons localisés appelées *formes mésomères*

→ Formes les + importantes = respectant règle de l'octet, avec maximum de liaisons, sans trop de charges formelles

→ Revenir sur les exemples (ion carbonate et benzene)

C) La liaison covalente et les molécules

(cf Jean chap 1.4)

→ Géométrie des molécules : modèle de Cram ; théorie VSEPR → influence liaison covalente sur géométrie de la molécule

→ Revenir sur moment dipolaire pour molécule polyatomique (cf Jean p. 22)

Tr : on a vu comment on pouvait décrire qualitativement la liaison covalente mais pourrait-on la décrire plus avec la théorie

II) Description orbitale de la liaison covalente

A) Approximations et hypothèses

(cf Fosset p. 470-471 et Jean p. 73-74)

→ Approximation de Born-Oppenheimer, monoélectronique et de la troncature de la combinaison linéaire des orbitales atomiques

B) Interaction de deux orbitales atomiques

(cf Jean p. 84-86 ; Fosset p. 472-499, Fleming chap 1)

→ Choisir un cas (peut-être le plus simple : H_2^+) et faire la résolution de l'équation de Schrödinger

→ Définir intégrales coulombienne, de résonnance et de recouvrement

→ déterminant séculaire

→ Représentation graphique des orbitales sur un diagramme et remplissage

Ccl

Ouv : triangle de Van Ketelaar et liaisons métalliques et ioniques ; ou systèmes conjugués (méthode de Hückel)

Autres plans

I) Description orbitale de la liaison covalente

A) Approximations et hypothèses

B) Cas d'une molécule diatomique homonucléaire

C) Cas d'une molécule diatomique hétéronucléaire

II) La liaison covalente dans les systèmes conjugués

A) Méthode de Hückel (simple avec exemple et étendue juste en rq)

B) Méthodologie

C) Applications aux polyènes