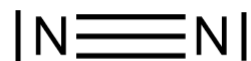


### Orbitales moléculaires de molécules diatomiques

1. Proposer une formule de Lewis du diazote  $N_2$  ( $Z(N) = 7$ ). De quel type de liaison chimique s'agit-il ?

**Solution:**

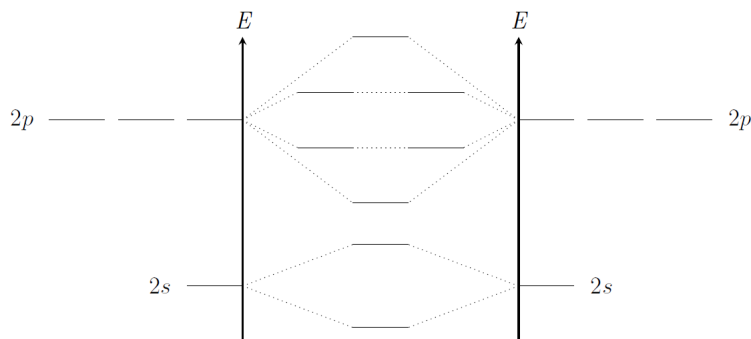


Il s'agit d'une triple liaison covalente.

2. Cette molécule possède-t-elle un moment dipolaire permanent ?

**Solution:** La molécule est apolaire.

Le diagramme d'interaction simplifié des orbitales atomiques  $2s$  et  $2p$  d'une molécule de type  $A_2$  (avec A, élément de la deuxième période) est présenté ci-dessous :

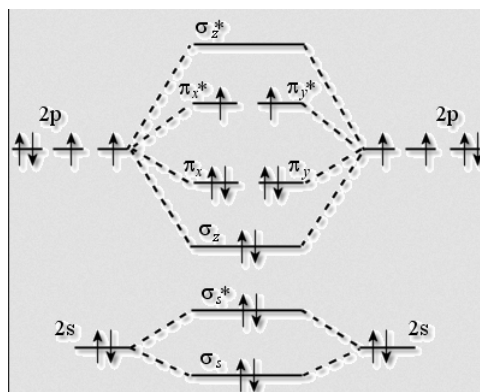


3. En règle générale, on ne représente pas, sur ces diagrammes simplifiés, les orbitales atomiques de type  $1s$ . Pour quelle raison ?

**Solution:** Les orbitales atomiques de type  $1s$  sont trop basses en énergie pour créer des interactions.

4. Reproduire sur la copie le diagramme et effectuer le remplissage des orbitales atomiques (OA) et des orbitales moléculaires (OM) pour la molécule de dioxygène ( $Z(O) = 8$ ).

**Solution:**



5. Calculer l'indice de liaison et le comparer à la formule de Lewis de la molécule de dioxygène.

**Solution:** L'indice de liaison s'écrit :

$$i = \frac{8 - 4}{2} = 2.$$

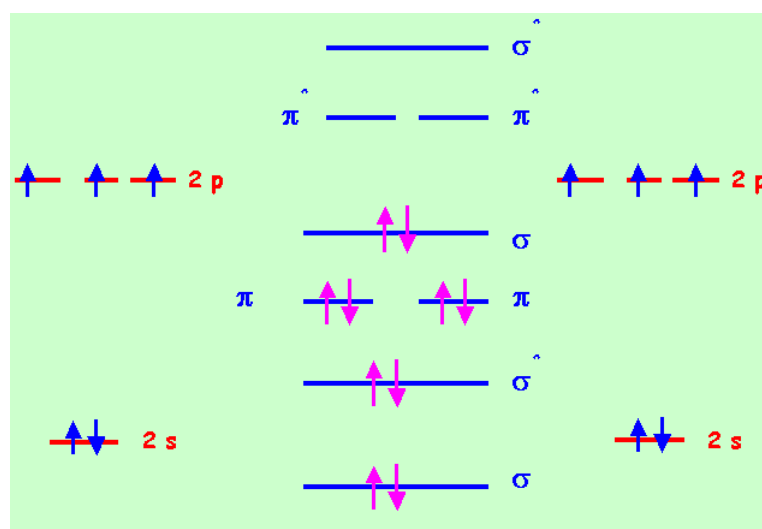
C'est cohérent avec la formule de Lewis du dioxygène.

6. Quelle information le diagramme d'OM donne-t-il sur la molécule de dioxygène par rapport à la formule de Lewis ?

**Solution:** On se rend compte que la molécule de dioxygène est paramagnétique.

7. Reproduire le diagramme et effectuer le remplissage des OA et des OM pour la molécule de diazote. Calculer l'indice de liaison et le comparer à la formule de Lewis de la molécule de diazote.

**Solution:**



L'indice de liaison s'écrit :

$$i = \frac{8 - 2}{2} = 3.$$

C'est cohérent avec la formule de Lewis du diazote.

8. La comparaison des molécules de type  $A_2$  de la deuxième période montre que  $O_2$  et  $F_2$  présentent un diagramme du type de celui présenté ci-dessus, alors que  $Li_2$ ,  $Be_2$ ,  $B_2$ ,  $C_2$  et  $N_2$  présentent un diagramme un peu différent. Sur la base des énergies des OA  $2s$  et  $2p$  des éléments de la deuxième période (tableau ci-dessous) expliquer l'origine de cette différence (le tracé du diagramme d'interaction n'est pas demandé). Pour quelle raison la molécule  $Ne_2$  n'est-elle pas stable ?

Élément	Li	Be	B	C	N	O	F	Ne
$E(2s)$ (eV)	-5,4	-9,4	-14,7	-19,4	-25,6	-32,4	-40,1	-48,4
$E(2p)$ (eV)	-3,5	-5,2	-5,7	-10,7	-12,9	-15,9	-18,6	-21,6

**Solution:** Les OA de type  $2s$  et  $2p$  sont proches en énergie pour les atomes de Li à N ce qui rajoute des interactions  $2s/2p$  dans le diagramme d'OM.

L'indice de liaison pour  $Ne_2$  vaut 0 ce qui explique la molécule n'est pas stable.