

Orbitales moléculaires des molécules diatomiques Synthèse du cours

Commençons par le cadre dans lequel on construit les OM.

Approximations fondamentales et méthode	
Approximations fondamentales	Méthode CLOA
<p><u>Approximation de Born-Oppenheimer</u></p> <p><u>Approximation monoélectronique (ou orbitale)</u></p>	

Dans le cadre du programme, on construit des diagrammes en traitant des interactions à deux orbitales.

Interaction de 2 OA	
Densité de probabilité de présence d'un électron dans un OM Ψ	Intégrale de recouvrement
	L'intégrale de recouvrement entre deux orbitales Φ_a et Φ_b est :

Pour construire un diagramme d'OM, il est nécessaire de faire le bilan des interactions. Pour cela, on utilise deux critères.

Conditions d'interaction de 2 OA	
<p><u>Critère de symétrie</u> : $S \neq 0$</p> <p><u>Conséquence</u> : Deux orbitales ne peuvent <i>à priori</i> interagir que si elles présentent la même symétrie vis-à-vis de tous les éléments de symétrie de la molécule.</p>	<p><u>Critère énergétique</u> : orbitales proches en énergie</p> <p><u>Conséquence</u> : les interactions entre orbitales trop éloignées en énergie sont négligées</p>

Lorsque deux orbitales interagissent, le recouvrement peut être de différente nature : axial (S_σ) ou latéral (S_π).

Diagrammes d'OM

Le diagramme d'OM emblématique de ce chapitre pour les molécules diatomiques homonucléaires, qu'il faut savoir construire sans la moindre indication, est le diagramme de O_2 (ou F_2). Les interactions $2s-2p$ sont négligées (elles ne peuvent pas l'être pour $N_2...$), si bien qu'on se ramène à quatre interactions à deux OA.

Diagramme non corrélé : cas de O_2 (et F_2)	
Diagramme d'OM	Représentation des OM

En accord avec le programme, on ne peut que demander des constructions pour des interactions à deux orbitales. Il en résulte que pour construire le diagramme corrélé (prise en compte des interactions s-p), l'énoncé doit vous fournir une indication.

Diagramme corrélé : cas de B ₂ (et Li ₂ , Be ₂ , C ₂ , N ₂ et F ₂)	
Diagramme d'OM	Expression des OM
<p>ordre énergétique inversé par rapport au diagramme non corrélé</p>	

Commenter un diagramme d'OM : on décrit au minimum CEF, paramagnétisme ($S \neq 0$) ou diamagnétisme ($S = 0$), ordre de liaison, confrontation avec modèle de Lewis.

Ordre de liaison

$$OL = \frac{N_{\text{électrons dans OM liantes}} - N_{\text{électrons dans OM antiliantes}}}{2}$$

Pour que l'on complète la fiche ensemble en vidéo, c'est ici :

[ORBITALES MOLÉCULAIRES : Synthèse du cours](#)

