

# Fiche 1

## Liason covalente

### Ressources utilisées

— Tutorat de L. PONTOGLIO, avec A. C. F.  
Le plan proposé par l'étudiant était :

1. Deux modèles
  - (a) Modèle de LEWIS
  - (b) Les orbitales moléculaires
2. Diagramme d'orbitales moléculaires homonucléaire
  - (a) Le dihydrogène  $H_2$
  - (b) Le dioxygène  $O_2$
3. Énergie de liaison (ou polarité des liaisons)

Avec, dans la première partie (qui peut constituer une introduction), une explicitation des limites du modèle de LEWIS : le paramagnétisme de  $O_2$  n'est pas expliqué !

**Remarque** Le plan qui suit est en partie celui proposé en correction.

— Voir fiche de M. LECONTE sur la liason covalente.

### Introduction

**Pédagogie** Niveau L2, avec les orbitales moléculaires.

Insister sur le fait que la liason covalente est un compromis entre l'interaction attractive entre un électron et un noyau et l'interaction répulsive entre deux électrons (ce qui amène à une distance d'équilibre... comme pour toutes les liaisons étudiées!). Cela amène à la vision usuelle de « mise en commun de deux électrons ».

Cette vision est bien prise en compte dans le modèle de LEWIS, connu des élèves ; mais il possède des défauts importants qui sont notamment :

- l'explication du magnétisme de  $O_2$  ;
- la compréhension de la nature des liaisons ( $\sigma$ ,  $\pi$ ...);
- la rationalisation de certaines réactivités (nucléo- et électrophilie).

## 1.1 Construire les orbitales moléculaires

### 1.1.1 Les règles à appliquer

**Exemple**  $H_2$  très facile, plus compliqué sur un autre homonucléaire, par exemple  $O_2$ .

- recouvrement non nul;
- (simplification) valence seulement // orbitales proches en énergie

**Remarque** On pourra faire remarque que  $H_2$  est soluble analytiquement... voire donner les résultats des calculs en introduction mais montrer qu'on ne peut pas faire de même pour les autres et donc développer là dessus la première partie.

### 1.1.2 Remplissage et premières interprétations

**Exemple** Paramagnétisme de  $O_2$ ...

## 1.2 Cas des diatomiques hétéronucléaire

### 1.2.1 Liaison toujours simple

**Exemple** HF.

### 1.2.2 Vers des indices de liaisons élevés ?

**Exemple** CO.

## Conclusion

Reprise des notions importantes (pourquoi et comment construire les orbitales moléculaires); prise de recul depuis les OA vers l'utilisation des OM (ouverture sur la construction informatique avec orbimol, méthode des fragments et application aux complexes... pour rationaliser les mécanismes, en chimie organique et organométallique).