

## TD 2 : Diagrammes orbitales des systèmes diatomiques

- Donnez une représentation schématique des orbitales pouvant interagir afin de former des liaisons dans les molécules diatomiques suivantes :  $H_2$ ,  $HCl$ ,  $CO$ ,  $CuO$
- Le tableau ci-dessous donne les énergies (en eV) des orbitales de valence des atomes des quatre premières lignes des blocs  $s$  et  $p$  du tableau périodique :

1s	H -13.6							He -24.6
2s	Li -5.4	Be -9.3	B -14.0	C -19.4	N -25.6	O -32.3	F -40.2	Ne -48.5
2p								
3s	Na -5.1	Mg -7.6	Al -11.3	Si -14.9	P -18.8	S -20.7	Cl -25.3	Ar -29.2
3p								
4s	K -4.3	Ca -6.1	Ga -12.6	Ge -15.6	As -17.6	Se -20.8	Br -24.1	Kr -17.5
4p								

Construisez, à partir des orbitales adéquates, le diagramme d'orbitales moléculaires des molécules suivantes :  $H_2$ ,  $NaH$ ,  $HF$ ,  $HCl$ . Pour chaque exemple, dites si la liaison est ionique ou covalente.

- On donne les distances d'équilibre et les énergies de dissociation de molécules diatomiques homonucléaires. Rappelez les diagrammes orbitaux donnés en cours pour ces molécules et commentez les données expérimentales à l'aide de ces diagrammes d'orbitales moléculaires.

	$C_2$	$N_2$	$O_2$	$F_2$
Distance d'équilibre (en pm)	124	110	121	142
Énergie de dissociation (en $\text{kJ mol}^{-1}$ )	585	940	493	155