

TD 3 : Diagrammes orbitales des systèmes polyatomiques

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								

1. On se propose d'étudier le diagramme d'orbitales de la molécule de BeH_2 et de la molécule hypothétique BeNa_2 .
 - (a) Dessinez les orbitales correspondant aux niveaux énergétiques des orbitales de valence du béryllium et des fragments $[\text{H} \cdots \text{H}]$ et $[\text{Na} \cdots \text{Na}]$ qui interagiront pour former les molécules BeH_2 et BeNa_2 .
 - (b) Tracez les diagrammes d'orbitales de BeH_2 et BeNa_2 en indiquant l'occupation des niveaux.
 - (c) La molécule BeNa_2 pourrait-elle exister ? Quelle serait la polarité des liaisons $\text{Be} - \text{Na}$?

2. On se propose de déterminer le diagramme d'orbitales de la molécule de CO_2 .
 - (a) Déterminez tout d'abord le diagramme d'orbitales du fragment $[\text{O} \cdots \text{O}]$.
 - (b) Déterminez le diagramme d'orbitales de la molécule de CO_2 en faisant interagir le fragment $[\text{O} \cdots \text{O}]$ avec un carbone situé entre les deux oxygènes.

3. On discutera ici deux diagrammes d'orbitales possibles pour la molécule d'ammoniac (NH_3) en géométrie pyramidale ou plane.
 - (a) Dessinez qualitativement le diagramme d'orbitales de H_3 dans une géométrie triangulaire.
 - (b) À partir de ce diagramme, dessinez le diagramme d'orbitales de la molécule NH_3 dans une géométrie pyramidale et dans une géométrie plane.
 - (c) Discutez la stabilité relative de ces deux géométries.