
QUESTIONS/RÉPONSES MQ 02

Comment peut-on prévoir la polarité d'une molécule avec son diagramme d'OM ?

L'allure des OM permet d'avoir une idée de la forme de la densité électronique, donc de la polarité : Si une orbitale moléculaire peuplée est fortement dissymétrique, la densité électronique sera principalement développée sur un atome, d'où la polarité de la liaison.

Complément : dans le cas diatomique hétéronucléaire l'OM liante possède un plus gros coefficient sur l'atome de plus grande électronégativité (dont l'OA est la plus basse en énergie), ce qui est cohérent avec la vision « Lewis » de la polarité.

Qu'entend-on par comparaison diagramme d'OM / structure de Lewis ?

La première comparaison possible est l'indice de liaison, qui peut-être calculé pour une diatomique par :

$$il = \frac{n - n^*}{2}$$

avec n le nombre d'électrons peuplant des orbitales moléculaires liantes, et n^* le nombre d'électrons peuplant des orbitales moléculaires antiliantes.

Un deuxième point de comparaison possible dans certains cas est d'établir une correspondance entre orbitales moléculaires non liantes développées sur un atome uniquement (ou quasiment), et doublets non liants sur la structure de Lewis. Cf par exemple le diagramme d'OM de HF ou de l'eau.