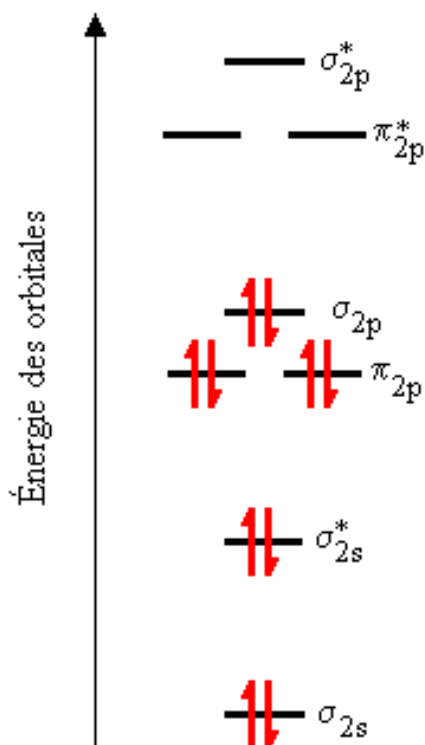


Ordre de liaison, énergie de liaison et longueur de liaison

L'ordre de liaison (O.L.) est défini par:

$$\text{O.L.} = \frac{n_{\epsilon}(\text{liante}) - n_{\epsilon}(\text{antiliante})}{2}$$

où n_{ϵ} (liante) et n_{ϵ} (antiliante) représentent le nombre d'électrons dans des orbitales moléculaires liantes et antiliantes, respectivement.



Par exemple, la figure ci-contre montre la configuration électronique de la molécule d'azote N_2 , représenté sur un diagramme d'énergie des orbitales moléculaires.

Dans ce cas, l'ordre de liaison est:

$$\begin{aligned} & (n_{\epsilon}(\sigma_{2s}) + n_{\epsilon}(\pi_{2p}) + n_{\epsilon}(\sigma_{2p}) - n_{\epsilon}(\sigma_{2s}^*)) / \\ & 2 \\ & = (2 + 4 + 2 - 2) / 2 \\ & = 6 / 2 = 3.0 \end{aligned}$$

Lorsque l'ordre de liaison augmente, l'énergie de la liaison augmente et la longueur de la liaison diminue, reflétant une stabilité de plus en plus grande de la molécule par rapport aux atomes séparés.

La figure ci-dessous le montre clairement pour quelques espèces diatomiques construites avec des atomes de la deuxième période:

