

Ex 9 Orbitales moléculaires

1° a) Faux : on ne fait pas forcément interagir toutes les OA présentes.

b) OA d'énergie comparable (nécessaire pour avoir un mélange important)

c) mêmes propriétés de symétrie (sinon le recouvrement s'annule)

d) recouvrement non nul (condition physique d'interaction)

2° a) Faux : les OM hautes d'une molécule n'ont pas toutes la même énergie

b) Les OM p_x et p_y ont la même énergie (dégénérescence)

c) Les OM dégénérés (définition)

3° a) Elle peut être antiliante mais ce n'est pas une obligation.

b) La plus basse en énergie parmi les OM non occupées.

c) C'est l'OM inoccupée de plus faible énergie.

d) Trop restrictif

4° a) Faux

b) Faux

c) Oui car on ne travaille qu'avec les OA de valence LCAO

d) Faux

$E_x 10$

1° Recouvrement nul : 3 et 4

2° OA orthogonales : 3 et 4

3° OM σ : 1 et 9

4° OM σ^* : 2 et 5

5° OM π : 6 et 7

6° OM π^* : 8

$E_x 11$

1° 2s et 2p

2° Diagramme non corrélié

$$4^{\circ} (1\sigma)^2 (1\sigma^*)^2 (2\sigma)^2 (\pi_x)^2 (\pi_y)^2 (\pi_x^*)^2 (\pi_y^*)^2 \quad \dot{L} = 1$$

molécule diamagnétique (pas d' e^- célibataires)

$$5^{\circ} |\underline{\bar{F}} - \underline{\bar{F}}|$$

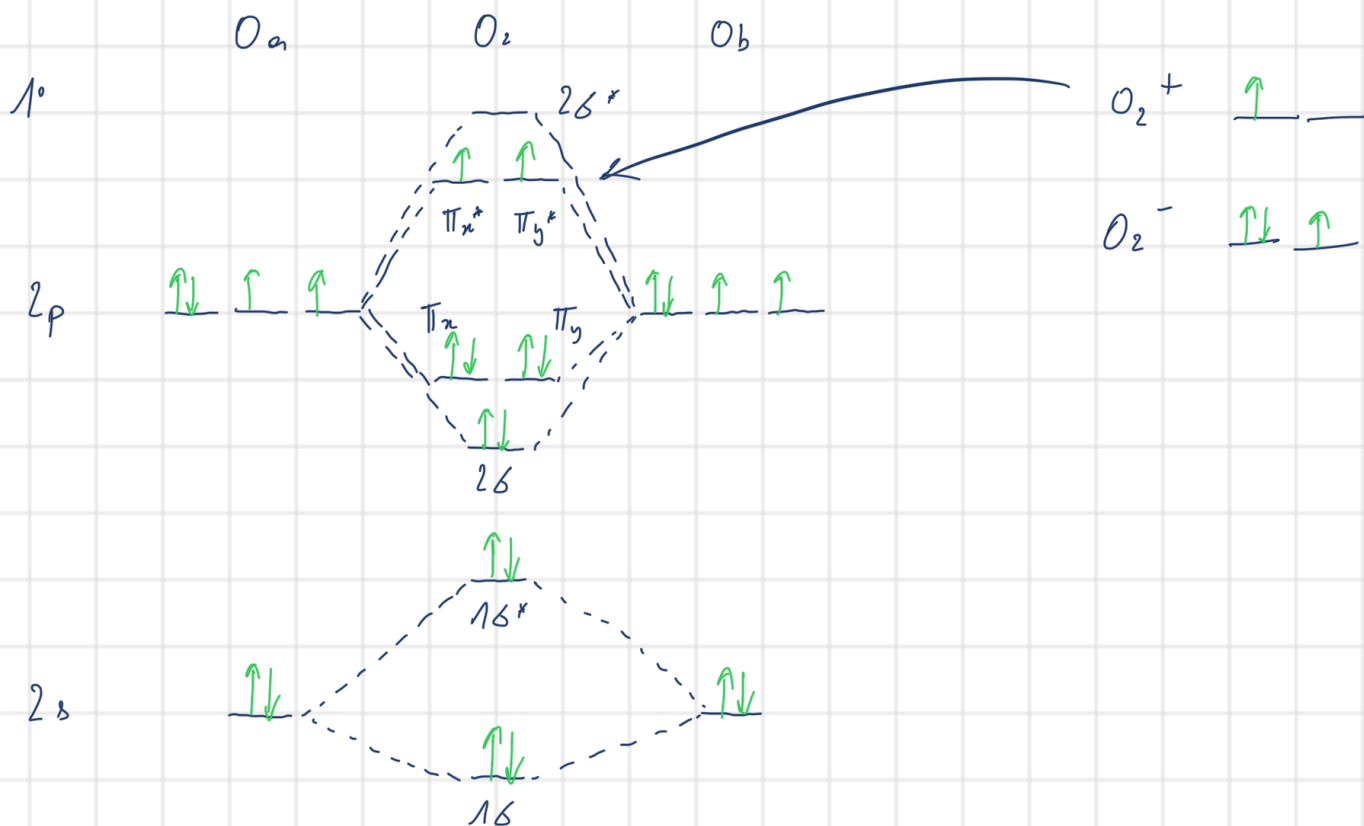
$$6^{\circ} F_2^+ (1\sigma)^2 (1\sigma^*)^2 (2\sigma)^2 (\pi_x)^2 (\pi_y)^2 (\pi_x^*)^2 (\pi_y^*)^2 \quad \dot{L} = 1,5$$

$$F_2^- (1\sigma)^2 (1\sigma^*)^2 (2\sigma)^2 (\pi_x)^2 (\pi_y)^2 (\pi_x^*)^2 (\pi_y^*)^2 (2\sigma^*)^2$$

$$\dot{L} = 0,5$$

$$dF_2^+ < dF_2 < dF_2^-$$

$\bar{E}_x$ 12



3° O_2 : $(1\sigma)^2(1\sigma^*)^2(2\sigma)^2(\pi_x)^2(\pi_y)^2(\pi_x^*)^1(\pi_y^*)^1$ $I(O_2) = 2$
paramagnétique

O_2^+ : $(1\sigma)^2(1\sigma^*)^2(2\sigma)^2(\pi_x)^2(\pi_y)^2(\pi_x^*)^1$ $I(O_2^+) = 1,5$
paramagnétique

O_2^- : $(1\sigma)^2(1\sigma^*)^2(2\sigma)^2(\pi_x)^2(\pi_y)^2(\pi_x^*)^2(\pi_y^*)^1$ $I(O_2^-) = 1,5$
paramagnétique

4° $d(O_2^+) < d(O_2) < d(O_2^-)$

5° $E_{I_1} = 10 \text{ eV}$

$\bar{E}_x$ 11

1° a) $\text{N} \quad 1s^2 2s^2 2p^3$

b) $\text{N} \equiv \text{N}$ liaison triple / Moment dipolaire nul.

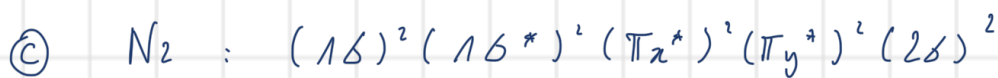
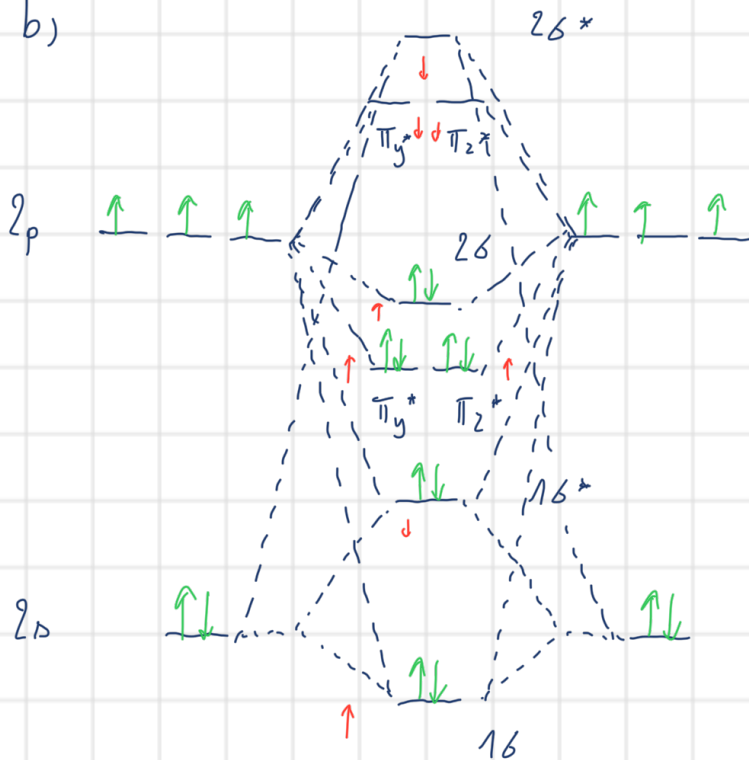
c) Quelques centaines de $\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$

Liaison triple $\approx 900 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$

d) Gaz inerte : atmosphère inerte pour conserver des aliments.

2° a) $2s$ et $2p$

b)



$I(\text{N}_2) = 3$ en accord avec une triple liaison

Les OM $1\sigma^*$ et 2σ correspondent aux 2 d.n.l

d) Lorsqu'on éloigne les deux atomes d'azote, le recouvrement des OA est moins efficace et les stabilisations ou destabilisations des OM par rapport aux OA de départ diminuent (flèches en rouge 2 b))