

Diagramme des OM

cas des espèces hétéronucléaires

Les molécules diatomiques mononucléaires conduisent à une répartition non symétrique des électrons, contrairement au cas des molécules homonucléaires

I / Condition de mélange de 2 OA :

Pour pouvoir mélanger deux OA, il faut qu'une interaction puisse exister, 2 conditions sont donc à respecter :

- $S \neq 0$, il faut un recouvrement non nul
- ΔE_{AB} faible, la différence d'énergie entre les deux OA doit être faible.

II / Application au cas de HHe^+ et HF

méthode générale : 1) Trouver les OA à considérer

↳ Toutes les OA de la couche de valence pleine ou vide

2) On doit trouver autant d'OM que l'on a d'OA

→ On prend toutes les OM dues aux interactions

⊕ on rajoute les OM (non liées) des OA qui n'ont aucune interactions.

3) Qui a ses OA les plus basses :

→ l'atome le plus électro-négatif

4) On détermine quelles OA de A et B ont un recouvrement non nul :

→ méthode des symétries

ou → méthode des représentations des OA

5) On regarde si on peut négliger une interaction

→ lorsque $\Delta E_{A/B}$ est trop grand

Exemples :

* 1) $N_V(H) = 1$, $N_V(He) = 2$

• Pour H : $1s^1 \Rightarrow 1s$

• Pour He : $1s^2 \Rightarrow 1s$

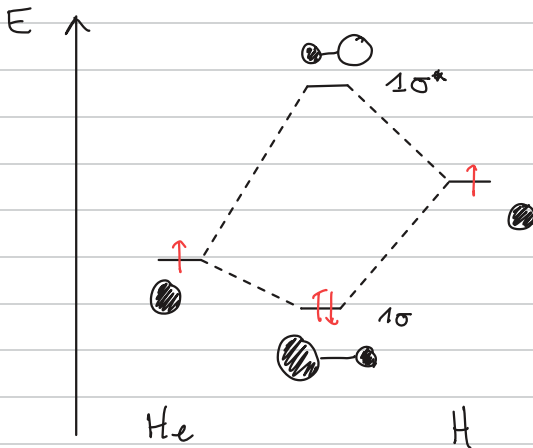
(On ne sait pas encore qui porte la charge $\oplus$)

2) On a 2 OA donc 2 OM

3) $\chi_H < \chi_{He}$

4) $1s_{He} / 1s_{He^+} \leftarrow \text{---} \bigcirc \text{---} S \neq 0$

5) On a aucune interaction à négliger



• Donc $\bar{i} = \frac{2-0}{2} = 1$

• $HeH^+ : 1\sigma^2$
 $\Rightarrow$ il y a une liaison simple σ

• Comparaison avec le modèle de Lewis :



↳ 1σ

L'électron dans la liaison est décalé vers He comme le montre

* 1) $N_v(H) = 1$, $N_v(F) = 7$

• Pair H: $1s^2 \Rightarrow 1s$

• Pair F: $1s^2 2s^2 2p^5 \Rightarrow 2s, 2p_x, 2p_y, 2p_z$

2) on a 5 OA donc on doit trouver 5 OM

3) $\chi_F > \chi_H$

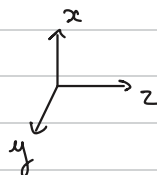
4) Les OA qui ont un recouvrement non nulle :

• $1s_H / 2s_F$:  $S \neq 0$

• $1s_H / 2p_{xF}$:  $S = 0$

• $1s_H / 2p_{yF}$:  $S = 0$

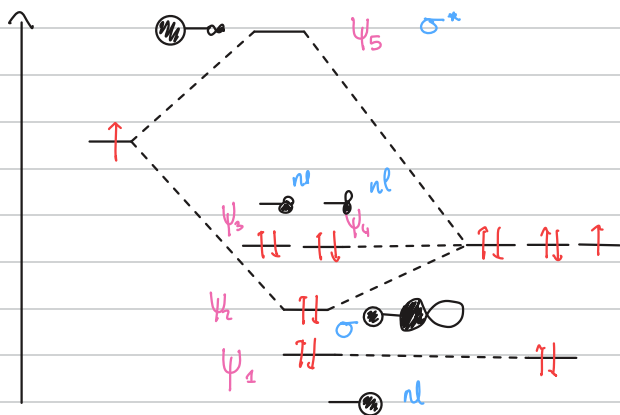
• $1s_H / 2p_{zF}$:  $S \neq 0$



5) On peut négliger : $1s_H$ et $2s_F$ car $\Delta E_{AB} \gg$

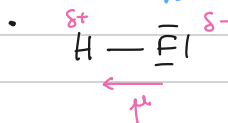
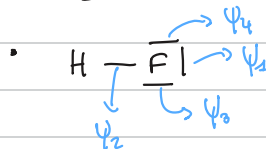
On trouve donc 2 OM (une liante et antiliante)

on rajoute donc les OM non liantes, il doit y en avoir 3 car on cherche 5 OM: elles sont issues de $2p_x, 2p_y$ et $1s$



• HF: $\psi_1^2 \psi_2^2 \psi_3^2 \psi_4^2$

• $i = \frac{2-0}{2} = 1$



Les électrons sont localisés vers F comme le montre 