

Examen Terminal d'Atomistique-L2 Physique

Durée 45mn

Structure électronique du diborane B_2H_6 .

La structure du diborane B_2H_6 a longtemps suscité beaucoup d'interrogation dans la communauté des chimistes. En effet les douze électrons de valence sont insuffisants pour décrire les huit liaisons qui apparaissent dans la structure de Lewis proposée figure 1 sur la base d'études cristallographiques. L'objectif de cet exercice est d'analyser la structure électronique de cette molécule par la théorie des Orbitales Moléculaires.

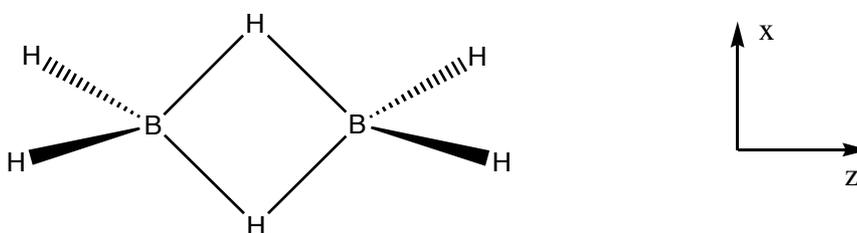


Figure 1 : Structure de Lewis de B_2H_6

Nous allons construire le Diagramme d'Orbitale Moléculaire (DOM) de B_2H_6 à partir de l'interaction des fragments $(BH_2)_2$ et H_2 .

Dans ce qui suit, parmi les OM du fragment BH_2 on n'utilisera que les OM n_σ et n_p . Ces 2 OM ainsi que leur occupation sont représentées figure 2.

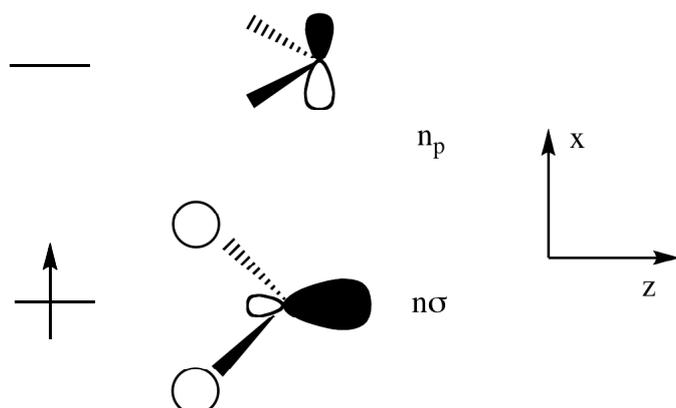


Figure 2 : Orbitales moléculaires n_p et n_σ du fragment BH_2 ainsi que leur occupation respective

Première partie : OM de $(\text{BH}_2)_2$

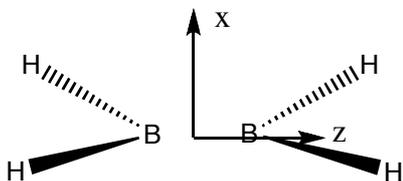


Figure 3 : Représentation schématique du fragment $(\text{BH}_2)_2$

1-Quelles sont les interactions permises par symétrie ? On considérera le plan yOz comme élément de symétrie.

2-Construire le DOM résultant de l'interaction des 2 fragments BH_2 . Dessiner les quatre OM. Analyser leur caractère liant, non liant, antiliant. Donner leur symétrie σ, π .

3-Donner la configuration électronique fondamentale.

Deuxième partie : OM de B_2H_6

1-Rappeler la forme des OM de H_2 .

2-Ecrire la réaction fictive que l'on peut envisager pour décrire la formation de B_2H_6 avec la méthode des Orbitales de fragment. Analyser la symétrie des six OM de fragment par rapport aux plans yOz et xOy .

3-En déduire le DOM de B_2H_6 .

4-Dessiner les OM de B_2H_6 . Analyser leur caractère liant, non liant, antiliant. Donner leur symétrie σ, π .

5-Quelle est la configuration électronique fondamentale de B_2H_6 ?

4-Combien y a-t-il d'électrons liants pour décrire la partie cyclique centrale B_2H_2 de la molécule ? Discuter de la structure électronique de B_2H_6 .