

Examen d'atomistique
L2 Physique
(45 min)

Jeudi 7 janvier 2009

Diagramme d'orbitales moléculaires du monoxyde de carbone CO

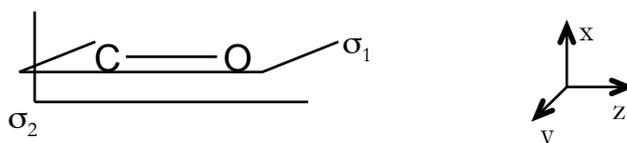


Figure 1 : Définition des plans de la molécule CO

On se propose de comprendre la structure électronique de la molécule CO.

Son diagramme d'Orbitales Moléculaires (OM) de valence est schématiquement représenté sur la **Figure 2**.

La figure 2 est à rendre avec votre copie.

- (1) Ecrire une structure de Lewis pour cette molécule.
- (2) Rappeler brièvement quels critères doivent respecter des OA pour donner naissance à des OM.
- (3) Identifier la symétrie des OA par rapport aux deux plans perpendiculaires représentés sur la **Figure 1**. Recenser ainsi les OA qui peuvent interagir.
- (4) Les OM σ et π sont-elles symétriques ou bien anti-symétriques par rapport aux plans xOz et yOz ? Rappeler ce qu'est une séparation σ/π .
- (5) Les interactions menant aux OM ϕ_3 , ϕ_4 , ϕ_6 et ϕ_7 ne sont pas représentées sur le diagramme (**Figure 2**).
 - (a) Quelles sont les OA qui mènent à ces OM?
 - (b) Compléter le diagramme pour faire apparaître les interactions qui mènent à ces OM.
 - (c) Dessiner soigneusement ces OM. Sont-elles de type σ ou π ? Ont-elles un caractère liant, non-liant ou anti-liant?
- (6) Les interactions menant aux OM ϕ_1 , ϕ_2 , ϕ_5 et ϕ_8 ne sont pas représentées non plus sur le diagramme.
 - (a) Quelles sont les OA qui mènent à ces OM?
 - (b) Ces OM sont représentées dans un ordre quelconque sur la **Figure 3**. Identifier les en indiquant les critères que vous utilisez.
 - (c) Représenter ces OM sur le diagramme. Sont-elles de type σ ou π ? Ont-elles un caractère liant, non-liant ou anti-liant?

- (7) Noter l'occupation des OM sur le diagramme et donner la configuration électronique pour l'état fondamental. Calculer les ordres de liaison σ et π .
- (8) Retrouvez-vous la structure de Lewis proposée à partir du diagramme? Proposez éventuellement une Structure plus appropriée.
- (9) Expliquer pourquoi la distance C-O varie très peu lorsqu'on passe de CO (113 pm) à CO⁺ (112 pm). Comment varierait la distance si on formait l'anion CO⁻?

Données

C : $Z=6$, $\epsilon_{2s}=-19,4$ eV, $\epsilon_{2p}=-10,7$ eV

O : $Z=8$, $\epsilon_{2s}=-32,4$ eV, $\epsilon_{2p}=-15,9$ eV

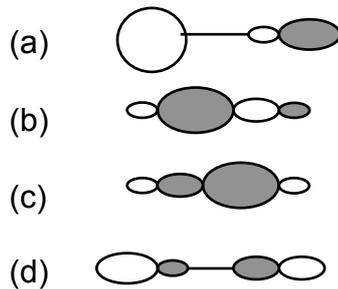


Figure 3 : Quatre des Orbitales Moléculaires de CO

N° Anonymat :

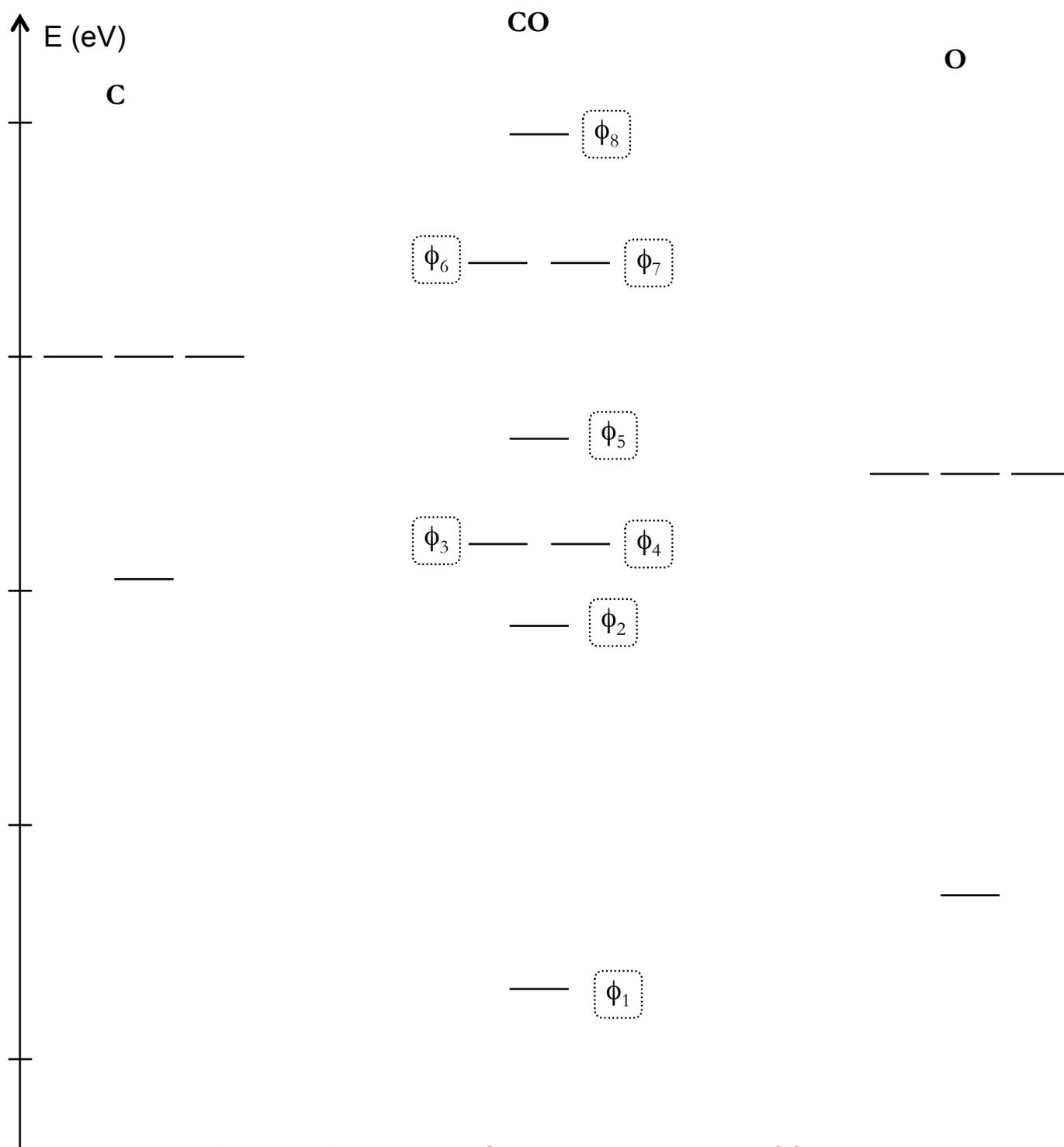


Figure 2 : Diagramme d'Orbitales Moléculaires de CO