

Atomistique et Liaison Chimique Examen-Partiel 31 Octobre 2008

Nom

Prénom

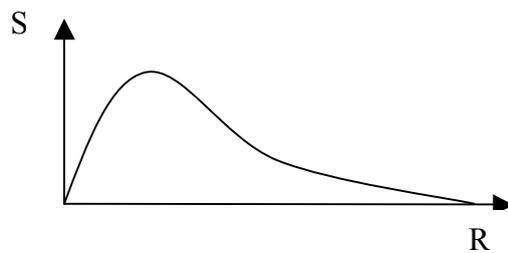
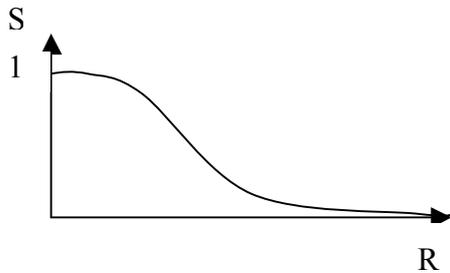
Groupe

Ex. 1 Le recouvrement

(5 points)

(a) Expliquer brièvement pourquoi le recouvrement, noté S , entre deux orbitales atomiques de valence sur deux atomes différents est une quantité importante pour l'analyse de la liaison chimique.

(b) L'évolution de S en fonction de R , R étant la distance entre les deux atomes, est représentée schématiquement ci-dessous dans trois cas différents:



Indiquer en-dessous de chaque schéma à quel(s) jeu(x) d'orbitales de la sélection suivante il peut correspondre (l'axe internucléaire est l'axe z):

1s, 1s

1s, $2p_x$

$2p_z$, 1s

$2p_x$, $2p_x$

$2p_x$, $2p_y$

$2p_x$, $2p_z$

$2p_z$, $2p_z$

e) Utiliser le diagramme pour discuter du caractère magnétique de S_2 .

f) Calculer l'ordre de liaison.

g) Des calculs récents sur la molécule de S_2 et ses ions ont conduit aux résultats suivants pour la distance inter-atomique S-S :

| | S_2^{2+} | S_2^+ | S_2 | S_2^- | S_2^{2-} |
|--------|------------|---------|-------|---------|------------|
| Re(pm) | 172 | 179 | 188 | 200 | 220 |

Interpréter l'évolution de la distance d'équilibre

