

Atomistique et Liaison Chimique Examen-Partiel 5 Novembre 2010

Nom

Prénom

Groupe

Première partie : Question de cours

N.B : plusieurs réponses sont possibles. Aucune justification n'est demandée.

1-L'orbitale la plus stable d'un atome d'hydrogène :

- (a) peut avoir n'importe quelle énergie
- (b) est une orbitale moléculaire
- (c) est une orbitale atomique
- (d) a pour énergie -13,6 eV
- (e) est une orbitale 2s
- (f) est une orbitale 1s
- (g) lorsqu'elle est occupée par un électron elle définit l'état fondamental de H.

2- Une orbitale moléculaire ϕ_i d'un système moléculaire donné :

- (a) peut avoir n'importe quelle énergie
- (b) a une énergie associée ϵ_i
- (c) existe réellement dans les molécules
- (d) est un modèle pour décrire un électron dans une molécule

3- L'orbitale moléculaire de H_2 (H_a-H_b) dans son état fondamental la plus basse en énergie :

- (a) a pour expression : $\phi^+ = (1_{SHA}) (1_{SHB})$
- (b) a pour expression : $\phi^+ = C_A (1_{SHA}) + C_B (1_{SHB})$ avec $C_A \neq C_B$
- (c) a pour expression : $\phi^+ = C_A (1_{SHA}) + C_B (1_{SHB})$ avec $C_A = C_B$
- (d) est représentée graphiquement par : 
- (e) est représentée graphiquement par : 
- (f) est représentée graphiquement par : 
- (g) est occupée par 2 électrons
- (h) a pour énergie 2×-13.6 eV
- (i) a pour énergie $-13,6 \times (C_A + C_B)$ eV
- (j) a une énergie dont le calcul est compliqué

4-L'OM la plus haute en énergie de H_2 dans son état fondamental

- (a) a pour expression : $\phi^- = C_A (1_{SHA}) - C_B (1_{SHB})$ avec $C_A \neq C_B$
- (b) a pour expression : $\phi^- = C_A (1_{SHA}) - C_B (1_{SHB})$ avec $C_A = C_B$
- (c) est représentée graphiquement : 
- (d) est représentée graphiquement par 
- (e) est représentée graphiquement par 
- (f) est occupée par 2 électrons
- (g) a pour énergie 2×13.6 eV

- (h) a pour énergie $13,6 \times (C_A - C_B)$ eV
 (i) a une énergie dont le calcul est compliqué

Deuxième partie : Diagramme d'orbitale moléculaire du radical hydroxyde OH

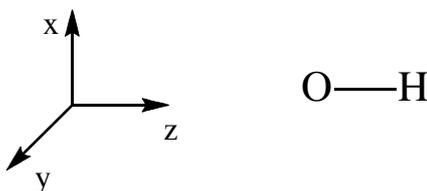


Figure 1 : Molécule OH

- Après avoir rappelé la configuration électronique de l'atome d'oxygène, donner, en le justifiant la liste des Orbitales Atomiques (OA) qui vont participer à la construction du diagramme d'interaction de la molécule OH.
- On suggère d'identifier la symétrie des OA par rapport aux plans de symétrie xz et yz représentés sur la figure 1. Donner le tableau de symétrie correspondant.
- Construire le DOM d'interaction simplifié. En quoi est-il simplifié ?
 - Dessiner schématiquement les OM. Donner leur symétrie (σ , π) et discuter de leur caractère liant, non liant et antiliant.
 - Calculer l'ordre de liaison.
 - Quelle(s) OM contribue(nt) à la description de la liaison OH. La probabilité d'y trouver les électrons autour de l'atome d'oxygène y est-elle identique à celle de trouver les électrons autour de l'atome d'hydrogène ?
 - En déduire la configuration fondamentale de l'anion (OH^-) et de la forme neutre de l'hydroxyde. Pourquoi la forme neutre est-elle appelée un radical ?
 - Proposer une structure de Lewis pour l'anion et la forme neutre de l'hydroxyde
 - Faire le lien en le justifiant entre les structures de Lewis de l'anion, du neutre de OH et le DOM simplifié .
- Construction du DOM « exact » du radical hydroxyde. En quoi peut-on le qualifier « d'exact » ? La figure 2 rassemble les orbitales de symétrie σ du DOM « exact ».
 - Commenter la forme des 3 orbitales présentées sur la figure 2.
 - Représenter le DOM « exact » et dessiner les OM en vous aidant de figure 2. discuter de leur caractère liant, non liant et antiliant.
 - Calculer l'ordre de liaison.
 - Quelle(s) OM contribue(nt) à la description de la liaison OH. La probabilité d'y trouver les électrons autour de l'atome d'oxygène y est-elle identique à celle de trouver les électrons autour de l'atome d'hydrogène ?
- Commenter les 2 DOM obtenus et discuter de la conséquence de l'approximation sur la description de la structure électronique du radical OH.



Figure 2 : Orbitale moléculaire de symétrie σ pour le DOM « exact » de OH.

- Données : $Z_O = 8$, $\epsilon_{2sO} = -33,7$ eV ; $\epsilon_{2p} = -17,1$ eV , $\epsilon_{1sH} = -13,6$ eV

