

**Université Paul Sabatier      L2 Chimie**  
**Atomistique et Liaison Chimique Examen deuxième session    Juin 2011**  
**Durée 1h 00**

Nom                                  Prénom                                  Groupe TD

**Exercice 1 Vrai ou Faux ? (x points)**

Certaines des affirmations suivantes sont exactes, mais d'autres sont fausses. Identifier celles qui sont fausses et proposer une version correcte.

a) L'électron de l'atome d'hydrogène est décrit par une fonction d'onde ou orbitale atomique (OA) :

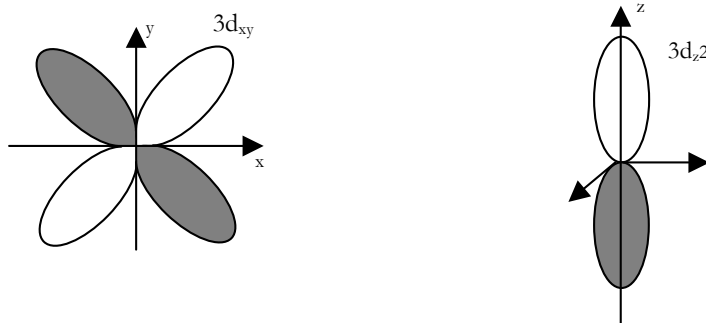
$$\Psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi) = R_{l,m}(r) \times Y_{n,l}(\theta, \varphi)$$

b) L'énergie d'un atome d'hydrogène est quantifiée. Son expression est la suivante :

$$E_n(eV) = -\frac{K \times Z^2}{n^2} \quad \text{avec } K = 13,6 \text{ eV}$$

c) L'orbitale atomique  $2p_x$  admet pour surface nodale le plan  $xOz$ .

d) Voici la représentation des OA  $3d_{xy}$  et  $3d_{z^2}$  :



**Exercice 2 : Diagrammes d'orbitales moléculaires (DOM) de systèmes diatomiques.**

*Lien Théorie-Expérience : Diagramme d'orbitales moléculaires et données expérimentales*

La figure 1 (à compléter et à rendre avec la copie) représente deux DOM de molécules diatomiques de type  $A_2$  où A est un atome de la deuxième période.

- 1) Préciser quelles sont les OA de valence qui interagissent par symétrie.
- 2) Suivant la molécule  $A_2$  considérée, l'ordre énergétique des OM de valence est  $1\sigma, 1\sigma^*, 2\sigma, \pi, \pi^*, 2\sigma^*$  (DOM 1) ou  $1\sigma, 1\sigma^*, \pi, 2\sigma, \pi^*, 2\sigma^*$  (DOM 2). Compléter la figure 1 en précisant le numéro des DOM et en nommant les OM. Justifier l'existence de ces 2 types de DOM.
- 3) Dessiner sur la figure 1 une représentation de l'OM  $1\sigma$  pour les DOM 1 et 2. Justifier son caractère liant et sa symétrie par rapport au centre d'inversion.
- 4) Ecrire les configurations électroniques des molécules  $B_2$  et  $C_2$  dans leur état fondamental en supposant qu'elles sont décrites par le DOM 1 puis par le DOM 2.

- $B_2$  et  $O_2$  sont des molécules à couches ouvertes montrant un caractère paramagnétique.  $C_2$  et  $N_2$  sont des molécules couches fermées et donc diamagnétiques. Montrer que les propriétés magnétiques de ces molécules permettent de choisir le DOM associé à  $B_2$  et  $C_2$ .
- La molécule  $C_2$  est une molécule observée dans le milieu interstellaire qui possède un mode de liaison original. A l'aide du calcul d'ordres de liaison (total,  $\sigma$ ,  $\pi$ ), commenter la nature des liaisons qui relient les 2 atomes de carbone dans  $C_2$ .
- L'orbitale moléculaire la plus **Haute Occupée** (HO) de la molécule  $N_2$  est une orbitale qui possède une symétrie de révolution autour de l'axe internucléaire. A quel cas correspond le DOM de  $N_2$  ?
- Expliquer pourquoi l'énergie de première ionisation de  $N_2$  (15,6 eV) est supérieure à celle de N. Pourquoi celle de  $O_2$  (12,1 eV) est inférieure à celle de O ?
- Ecrire la configuration électronique de la molécule  $N_2$  excitée obtenue en faisant passer un électron de l'orbitale la plus haute occupée à l'orbitale la plus **Basse Vacante** (BV). Quelle modification structurale doit-on observer lors du passage de  $N_2$  de l'état fondamental à l'état excité ?

## TABLEAU PÉRIODIQUE DES ÉLÉMENTS

<http://www.kj-spl.it/periodni/fr/>

PÉRIODE	GROUPE IA												GROUPE VIIIA					
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1	H 1 1.0079 HYDROGÈNE	He 2 4.0026 HÉLIUM																
2	Li 3 6.941 LITHIUM	Be 4 9.0122 BÉRYLLIUM											B 5 10.811 BORE	C 6 12.011 CARBONE	N 7 14.007 AZOTE	O 8 15.999 OXYGÈNE	F 9 18.998 FLUOR	Ne 10 20.180 NÉON
3	Na 11 22.990 SODIUM	Mg 12 24.305 MAGNÉSIMUM											Al 13 26.982 ALUMINIUM	Si 14 28.086 SILICIUM	P 15 30.974 PHOSPHORE	S 16 32.065 SOUFRE	Cl 17 35.453 CHLORE	Ar 18 39.948 ARGON
4	K 19 39.098 POTASSIUM	Ca 20 40.078 CALCIUM	Sc 21 44.956 SCANDIUM	Ti 22 47.867 TITANE	V 23 50.942 VANADIUM	Cr 24 51.996 CHROME	Mn 25 54.938 MANGANÈSE	Fe 26 55.845 FER	Co 27 58.933 COBALT	Ni 28 58.693 NICKEL	Cu 29 63.546 CUVRE	Zn 30 65.39 ZINC	Ga 31 69.723 GALLIUM	Ge 32 72.64 GERMANIUM	As 33 74.922 ARSENIC	Se 34 78.96 SÉLÉNIUM	Br 35 79.904 BROME	Kr 36 83.80 KRYPTON
5	Rb 37 85.468 RUBIDIUM	Sr 38 87.62 STRONTIUM	Y 39 88.906 YTRIUM	Zr 40 91.224 ZIRCONIUM	Nb 41 92.906 NICKELIUM	Mo 42 95.94 MOLYBDÈNE	Tc 43 (98) TECHNÉTIUM	Ru 44 101.07 RUTHÉNIUM	Rh 45 102.91 RHODIUM	Pd 46 106.42 PALLADIUM	Ag 47 107.87 ARGENT	Cd 48 112.41 CADMIUM	In 49 114.82 INDIUM	Sn 50 118.71 ÉTAIN	Sb 51 121.76 ANTIMOINE	Te 52 127.60 TELLORE	I 53 126.90 IODE	Xe 54 131.29 XÉNON
6	Cs 55 132.91 CÉSIMUM	Ba 56 137.33 BARYUM	La-Lu 57-71 Lanthanides	Hf 72 178.49 HAFNIUM	Ta 73 180.95 TANTALE	W 74 183.84 TUNGSTÈNE	Re 75 186.21 RHÉNIUM	Os 76 190.23 OSMIUM	Ir 77 192.22 IRIDIUM	Pt 78 195.08 PLATINE	Au 79 196.97 OR	Hg 80 200.59 MERCURE	Tl 81 204.38 THALLIUM	Pb 82 207.2 PLOMB	Bi 83 208.98 BISMUTH	Po 84 (209) POLONIUM	At 85 (210) ASTATE	Rn 86 (222) RADON
7	Fr 87 (223) FRANCIUM	Ra 88 (226) RADIUM	Ac-Lr 89-103 Actinides	Rf 104 (261) RUTHÉFIUM	Db 105 (262) DUBNIUM	Sg 106 (266) SEABORGIUM	Bh 107 (264) BOHRLIUM	Hs 108 (277) HASSIUM	Mt 109 (268) MEITNERIUM	Uun 110 (281) UNUNNIUM	Uuu 111 (272) UNUNUNIUM	Uub 112 (285) UNUNBIUM	Uuq 114 (289) UNUNQUADIUM					

**Lanthanides**

57 138.91 La LANTHANE	58 140.12 Ce CÉRIUM	59 140.91 Pr PRASEODYME	60 144.24 Nd NÉODYME	61 (145) Pm PROMÉTHIUM	62 150.36 Sm SAMARIUM	63 151.96 Eu EUROPIUM	64 157.25 Gd GADOLINIUM	65 158.93 Tb TERBIUM	66 162.50 Dy DYSPROSIUM	67 164.93 Ho HOLMIUM	68 167.26 Er ERBIUM	69 168.93 Tm THULIUM	70 173.04 Yb YTTÉRIUM	71 174.97 Lu LUTÉTIUM
-----------------------------	---------------------------	-------------------------------	----------------------------	------------------------------	-----------------------------	-----------------------------	-------------------------------	----------------------------	-------------------------------	----------------------------	---------------------------	----------------------------	-----------------------------	-----------------------------

**Actinides**

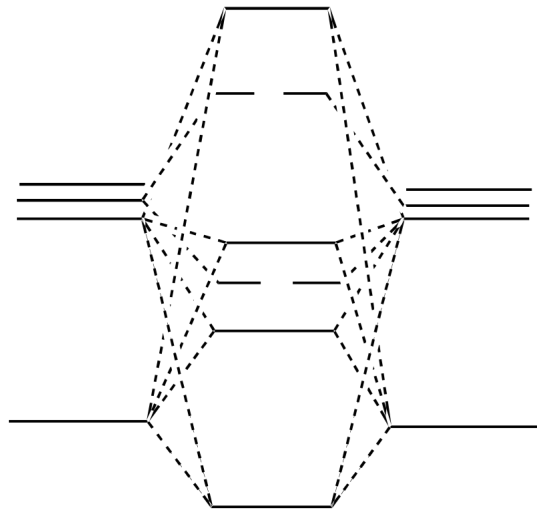
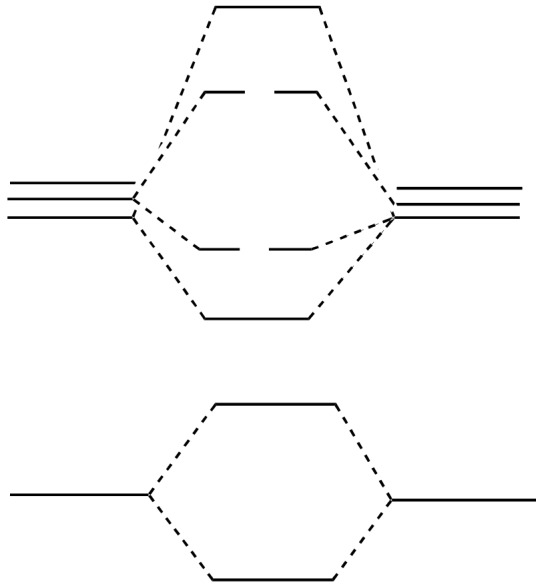
89 (227) Ac ACTINIUM	90 232.04 Th THORIUM	91 231.04 Pa PROTACTINIUM	92 238.03 U URANIUM	93 (237) Np NEPTUNIUM	94 (244) Pu PLUTONIUM	95 (243) Am AMÉRICIUM	96 (247) Cm CURIUM	97 (247) Bk BERKÉLIUM	98 (251) Cf CALIFORNIUM	99 (252) Es ENSTÉNIUM	100 (257) Fm FERMIUM	101 (258) Md MÉNDELÉVIUM	102 (259) No NOBÉLIUM	103 (262) Lr LAWRENCIUM
----------------------------	----------------------------	---------------------------------	---------------------------	-----------------------------	-----------------------------	-----------------------------	--------------------------	-----------------------------	-------------------------------	-----------------------------	----------------------------	--------------------------------	-----------------------------	-------------------------------

(1) Pure Appl. Chem., 73, No. 4, 667-693 (2001)  
La masse atomique relative est donnée avec 6 chiffres significatifs. Pour les éléments qui n'ont pas de nucléides stables, la valeur entre parenthèses indique le nombre de masse de l'isotope de l'élément ayant la durée de vie la plus grande.  
Toutefois, pour les trois éléments Th, Pa et U qui ont une composition isotopique terrestre connue, une masse atomique est indiquée.

Editor: Michel Denis

Nom

Prénom



DOM n° \_\_\_\_

DOM n° \_\_\_\_

