

Juin 2009

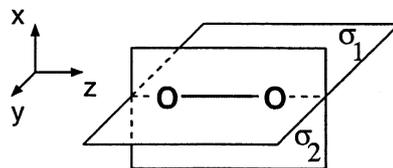
Examen Terminal d'Atomistique - L2 Physique - Deuxième session.

Durée 45min

Autour de la liaison carbone-oxygène

Nous nous proposons de déterminer les orbitales moléculaires (OM) du système π du dioxyde de carbone CO_2 par la méthode des fragments. Les 2 fragments de départ seront la molécule de dioxygène étirée et l'atome de carbone.

Première partie: OM de O_2



- Quelles sont les orbitales atomiques (OA) qui participent à la construction du diagramme d'interaction ? Justifier.
- Recenser les interactions possibles par symétrie. Peut-on simplifier le diagramme d'interaction ? Comment ? Pourquoi ?
- Construire le diagramme d'OM de O_2 . Dessiner schématiquement les OM.
- Identifier les OM σ et π .

Deuxième partie : OM π de CO_2

- Proposer une structure de Lewis pour la molécule de CO_2 .
- Quelles sont les OA du carbone qui peuvent interagir par symétrie avec les OM π de O_2 ? Les éléments de symétrie pertinents pour résoudre ce problème sont les plans xoy , xoz et yoZ . (Le repère est le même que celui utilisé dans la première partie).
- Compléter le schéma proposé à la fin du sujet :
 - Préciser la forme des orbitales de fragment de départ pour les 2 fragments.
 - Donner la forme des OM π de CO_2 .
 - La molécule de CO_2 possède un centre d'inversion. Avec quel atome coïncide t'il ? Préciser la symétrie des OM obtenues (π_u et π_g).
- Sachant que les OM π liantes et non liantes entre C et O sont doublement occupées, donner la configuration électronique fondamentale limitée aux électrons π .
- Faire le lien avec la structure de Lewis de CO_2 .

f) Expliquer pourquoi la longueur des liaisons CO est pratiquement la même dans CO_2 et dans CO_2^+ (respectivement 116 et 118 pm).

Élément	1s	2s	2p
He	-25.0	-4.8	-3.5
Li	-67.5	-5.4	-3.6
Be	-128.7	-8.4	-6.6
B	-209.2	-13.3	-8.4
C	-308.3	-19.3	-11.7
N	-425.3	-25.8	-15.5
O	-562.4	-33.7	-17.1
F	-717.8	-42.7	-19.9
Ne	-891.7	-52.5	-23.1

Données: Oxygène $Z=8$, Carbone $Z=6$.

Nom

Prénom

N° de Carte d'étudiant

==

==

==

C

O-----O

O—C—O