

CH3 - Applications - Corrigé

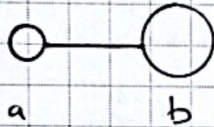
* Uniquement s'il s'agit d'un examen.

1.

$$\psi_1 = C_{1a} \times 1s_a + C_{1b} \times 1s_b$$

$$\psi_2 = C_{2a} \times 1s_a + C_{2b} \times 1s_b$$

2.



3.



4.

	a	b	c	d	e	f	g	h
	2	6	1	4	7	3	8	5

5.

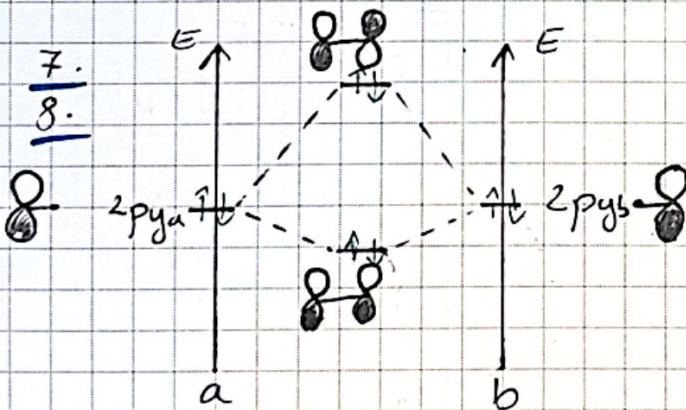


6.



7.

8.

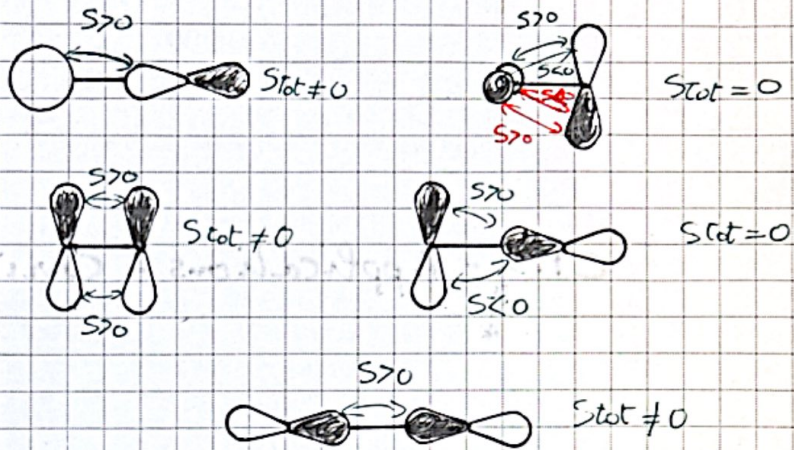


9. L'orbitale liante est plus proche de l'OA de O (car $X(O) > X(C)$ donc + basse en énergie) $\Rightarrow$ coefficient de O $>$ celui de C
 l'orbitale antiliante est plus proche de l'OA de C $\Rightarrow$ coeff^t de C $>$ celui de O.

N°

.../...

10. (9bis)



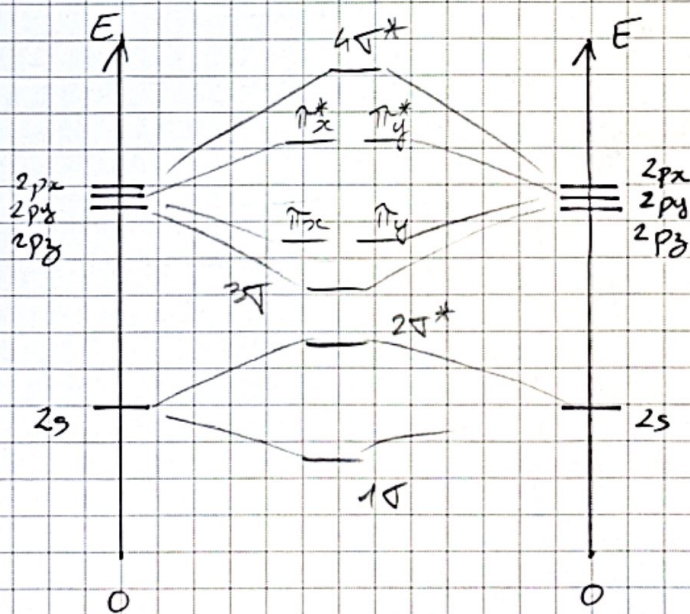
11.

orbitale	s	p_x	p_y	p_z
$\text{Plan}(yOz)$	S	AS	S	S
$\text{Plan}(xOz)$	S	S	AS	S

12. 13. 14. à enlever, hors propos

15. $2p_x$, $2p_y$ et $2s$ conduisent à des orbitales non liantes

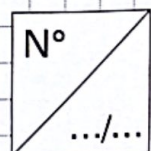
16.



17. Orbitale moléculaire σ plus stable que σ^* $\pi \rightarrow$ interaction

$2p_z$ en dessous de $2p_x$

De la même manière, l'orbitale $2p_x$ est au dessus de l'orbitale $2p_z$



$$\begin{array}{lll}
 \underline{18.} & 1 \rightarrow 1\sigma & 2 \rightarrow \pi_x \\
 & 4 \rightarrow \pi_y & 5 \rightarrow \pi_x^* \\
 & 7 \rightarrow 2\sigma^* & 8 \rightarrow 3\sigma
 \end{array}
 \quad
 \begin{array}{l}
 3 \rightarrow \pi_y^* \\
 6 \rightarrow 4\sigma^*
 \end{array}$$

19. Parce qu'une OM non liante est localisée sur l'atome et n'explique pas la formation de liaison. Ses e^- n'interviennent pas dans l'ordre de liaison.

$$\underline{20.} \quad (1\sigma)^2 (2\sigma^*)^2 (3\sigma)^2 (\pi_x)^2 (\pi_y)^2 (\pi_x^*)^1 (\pi_y^*)^1$$

$$i = \frac{8-4}{2} = 2$$

21.

$$\langle 0 = 0 \rangle$$

N°

.../...