

Chimie quantique

Chapitre 2 : Orbitales moléculaires

I) Etude de la molécule de dihydrogène

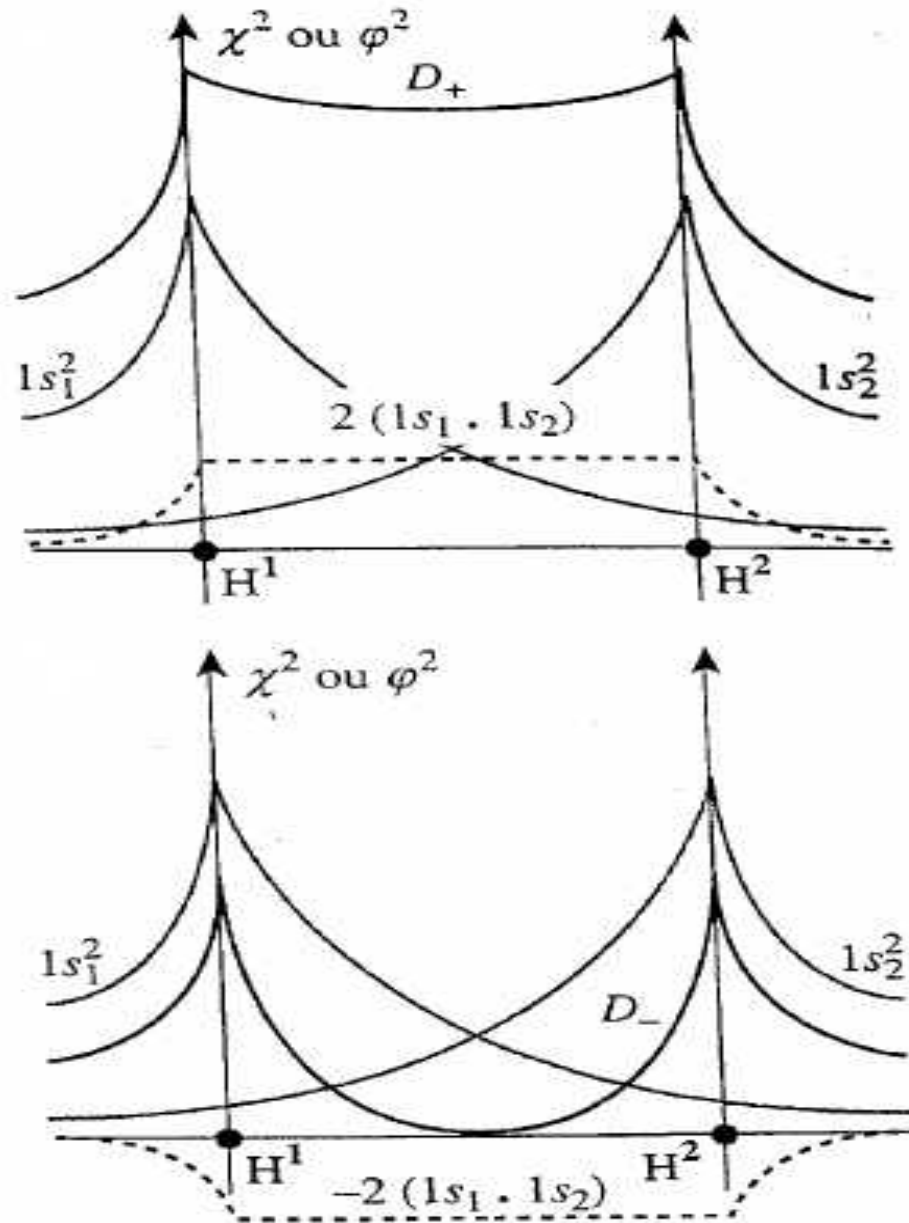
1) Systeme étudié et approximations

Approximations :

- Approximation de Born Oppenheimer
- Approximation monoélectronique
- Approximation **CLOA**

2) Expression des OM

3) Représentation des OM



4) Diagramme d'interaction

Diagramme : cf tableau

Remplissage : HO et BV

Indice de liaison

II) Etude de différentes molécules homonucléaires

1) Etude de He₂

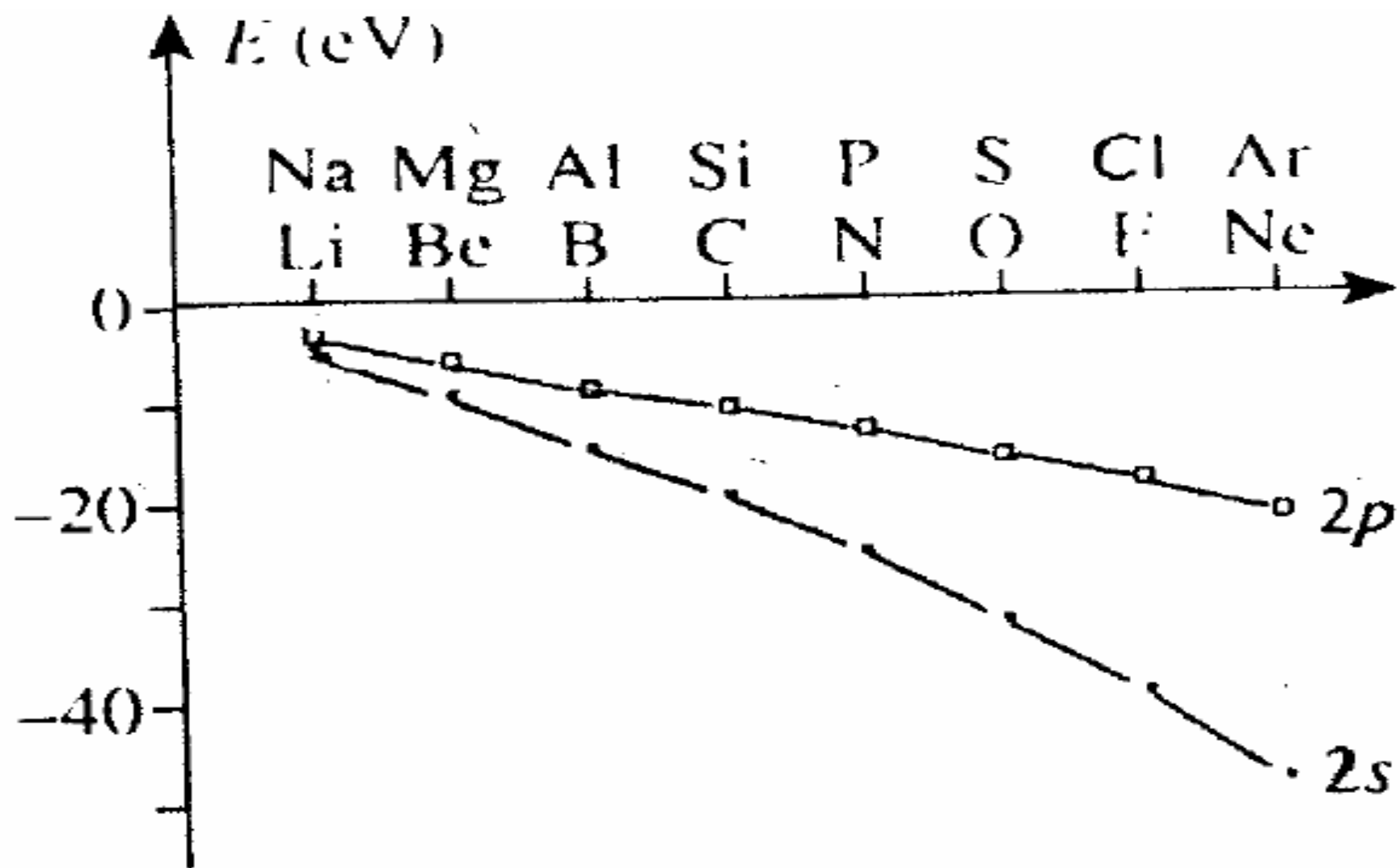
2) Interactions à envisager

3) Construction du diagramme d'orbitales moléculaires

4) Etude du dioxygène

5) Propriétés des éléments de la seconde période

X_2	N_e	CONFIGURATION	MAGNÉTISME	O.L.	TYPE	E_1 (kJ.mol ⁻¹)	d (pm)
Li ₂	2	σ_s^2	D	1	1 σ	-104	267
Be ₂	4	$\sigma_s^2\sigma_s'^2$	-	0	-	-	-
B ₂	6	$\sigma_s^2\sigma_s'^2\pi_x^1\pi_y^1$	P	1	1 π	-288	159
C ₂	8	$\sigma_s^2\sigma_s'^2\pi_x^2\pi_y^2$	D	2	2 π	-599	124
N ₂	10	$\sigma_s^2\sigma_s'^2\pi_x^2\pi_y^2\sigma_z^2$	D	3	1 σ + 2 π	-941	110
O ₂	12	$\sigma_s^2\sigma_s'^2\sigma_z^2\pi_x^2\pi_y^2\pi_x^1\pi_y^1$	P	2	1 σ + 1 π	-493	121
F ₂	14	$\sigma_s^2\sigma_s'^2\sigma_z^2\pi_x^2\pi_y^2\pi_x^2\pi_y^2$	D	1	1 σ	-156	142
Ne ₂	16	$\sigma_s^2\sigma_s'^2\sigma_z^2\pi_x^2\pi_y^2\pi_x^2\pi_y^2\sigma_z'^2$	-	0	-	-	-



Évolution des niveaux d'énergie ns et np des éléments des deuxième et troisième périodes.

III) Molécules diatomiques hétéronucléaires

1) Construction des orbitales moléculaires

Différence d'énergie des orbitales atomiques.

Exemple de HF

- $E_{1s}(\text{H}) = -13,6 \text{ eV}$
- $E_{2s}(\text{F}) = -37,9 \text{ eV}$
- $E_{2p}(\text{F}) = -19,4 \text{ eV}$

2) Dissymétrie des OM

IV) Molécules comportant plus de deux atomes

1) Méthode des orbitales de fragments

Le problème se simplifie en se ramenant à l'interaction de **deux fragments**.

Ils sont construits en tenant compte des **éléments de symétrie** de la molécule.

Les orbitales de fragments se combinent comme les OA :

- énergies voisines ;
- symétrie communes.

2) Diagramme d'OM de la molécule d'eau

