

CQ2 – Description quantique de la liaison chimique

1. Interactions électroniques dans les molécules

1.1. Cadre d'étude

- 1.1.1. Approximation de Born-Oppenheimer
- 1.1.2. Approximation orbitalaire
- 1.1.3. Combinaisons linéaires d'orbitales atomiques

1.2. Critères d'interaction de deux orbitales atomiques

2. Molécules diatomiques

2.1. Dihydrogène

- 2.1.1. Base de projection
- 2.1.2. Orbitales moléculaires
- 2.1.3. Diagramme d'OM

2.2. Molécules homonucléaires de la 2^e période

- 2.2.1. Base de projection
- 2.2.2. Diagrammes d'OM

2.3. Molécules diatomiques hétéronucléaires

- 2.3.1. Fluorure d'hydrogène
- 2.3.2. Analyse du diagramme de CO

3. OM par la méthode des fragments

3.1. Recouvrement et symétries

3.2. Ordre énergétique

3.3. Analyse d'un diagramme de fragments

4. Systèmes π délocalisés

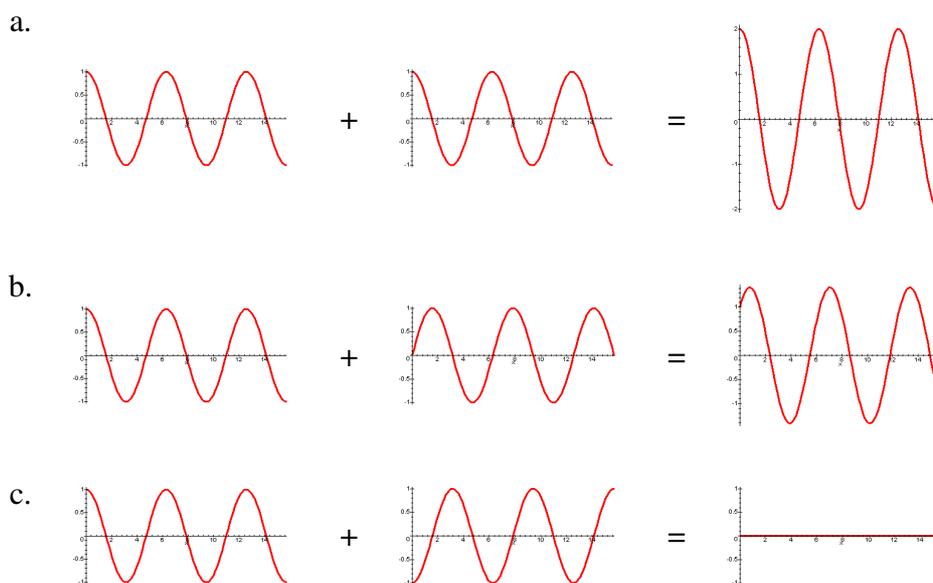
4.1. Intérêt de l'étude

4.2. Structure électronique des molécules conjuguées

4.3. Conséquences de la délocalisation

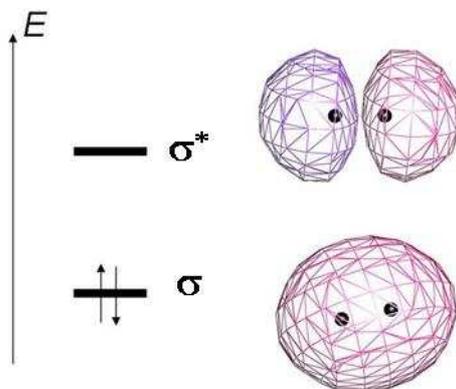
4.4. Effet de substitution

Interférences de deux ondes :



Interactions d'ondes simples. a. en phase. b. en décalage de phase. c. en opposition de phase.

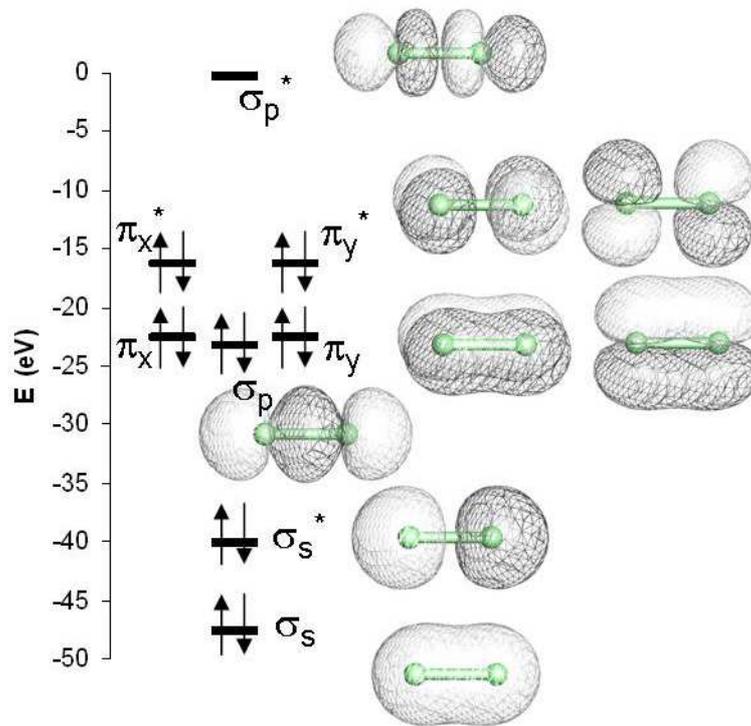
Orbitales moléculaires du dihydrogène (les points noirs matérialisent la position des noyaux) :



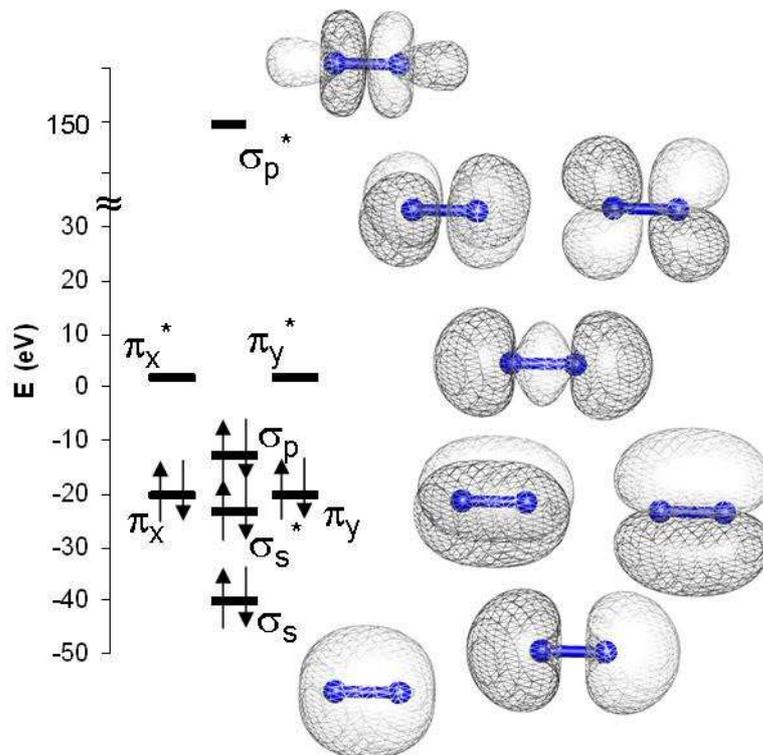
Propriétés des molécules A₂ :

	d_{A-A} (nm)	$\Delta E_{2s/2p}$ (eV)	I	magnétisme
F ₂	0,142	21,76	1	diamagnétique
O ₂	0,121	19,58	2	paramagnétique
N ₂	0,110	11,97	3	diamagnétique
C ₂	0,124	8,70	2	diamagnétique
B ₂	0,159	5,98	1	paramagnétique
Be ₂	-	3,26	0	-
Li ₂	0,267	2,18	1	diamagnétique

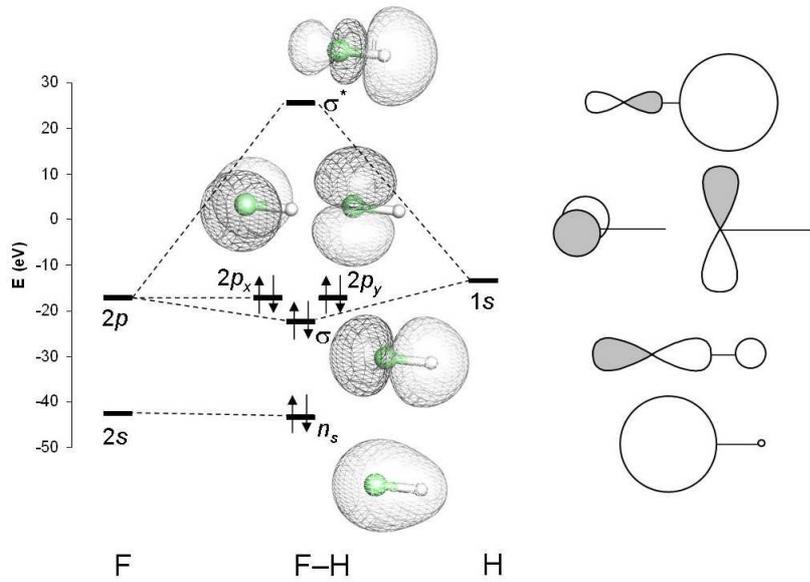
Orbitales moléculaires du difluor, exemple de diagramme non corrélé (calcul Jimp2 avec la longueur F–F expérimentale 143 pm) :



Orbitales moléculaires du diazote, exemple de diagramme corrélé (calcul Jimp2 avec la longueur N–N expérimentale 109,8 pm) :



Orbitales moléculaires de H–F (calcul Jimp2 avec la distance H–F optimisée en MM-UFF 98,6 pm) ; représentation des surfaces iso-densité et représentations schématiques correspondantes :



Orbitales moléculaires de CO (calcul Jimp2 avec la distance C–O expérimentale 112,8 pm) ; représentation des surfaces iso-densité et représentations schématiques correspondantes :

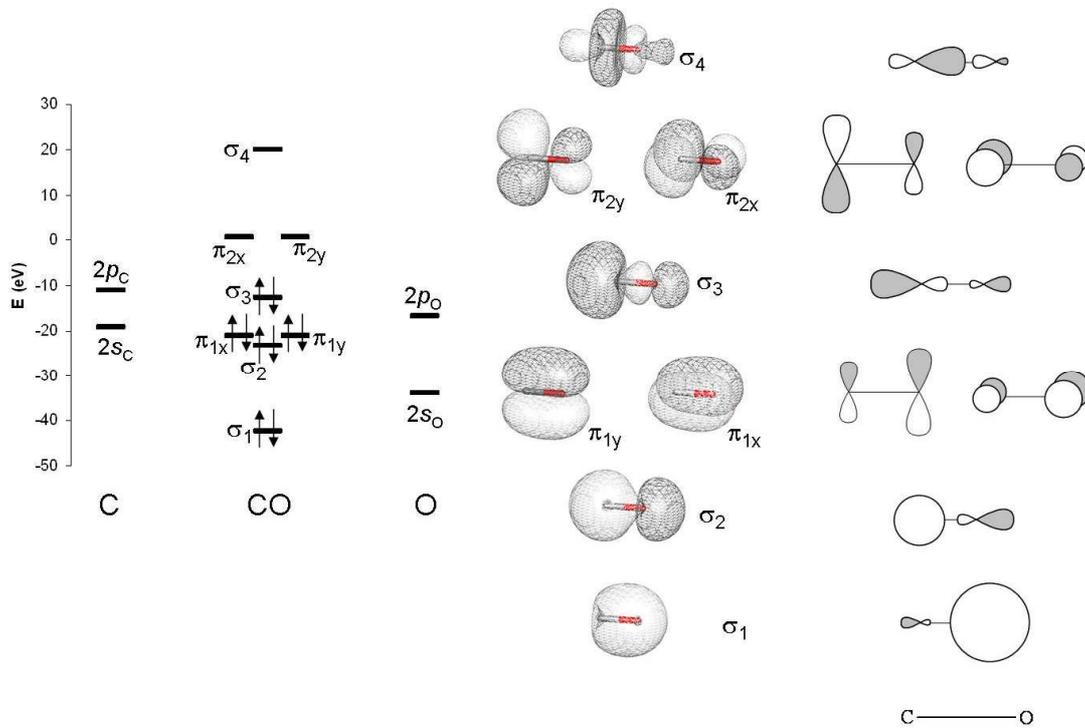


Diagramme de fragments de valence de l'éthène (calcul Jimp2, diagramme partiel : manque les OM de haute énergie) :

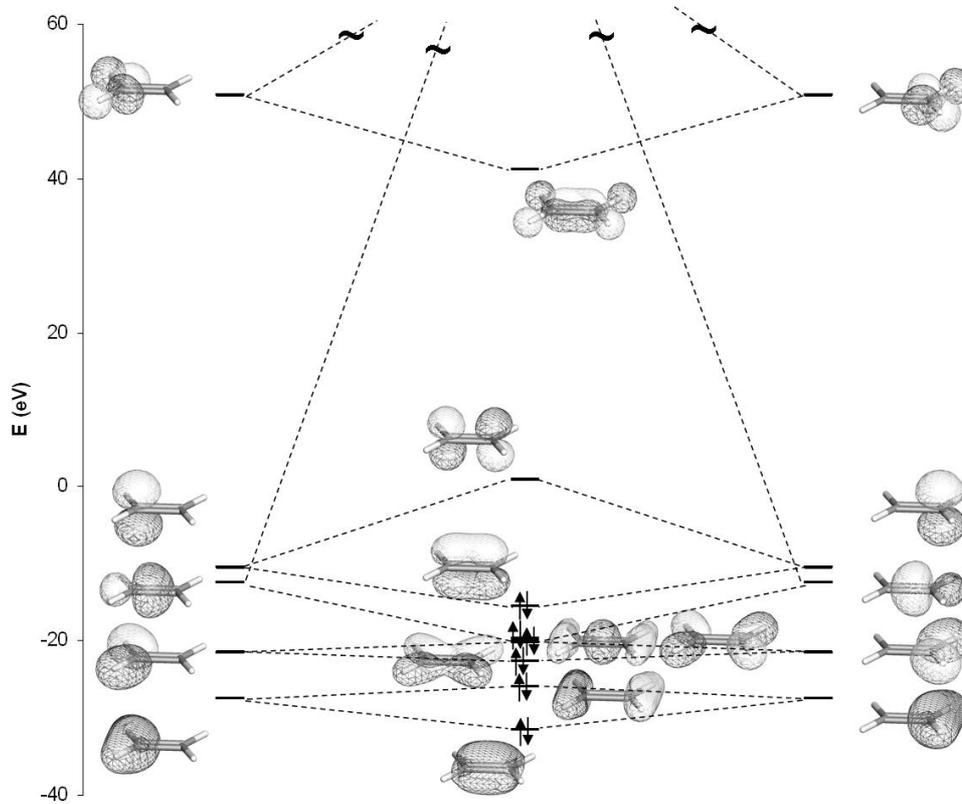
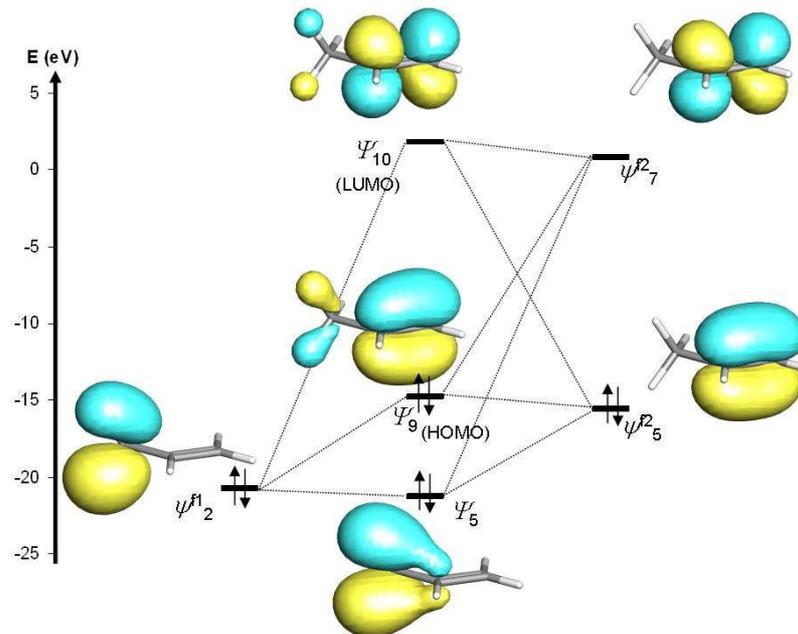


Diagramme de fragments du système π du propène (calcul Jimp2)



Orbitales moléculaires du butadiène :

